

TITO LIVIO DOMINGUES

**AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PRATOS VALVULADOS COM *DOWNCOMER*
E PRATOS *DUALFLOW* EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO INDUSTRIAIS**

Dissertação apresentada como requisito parcial
para a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Química no Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Química da
Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
Área de concentração: Modelagem e
Simulação de Processos Químicos

Orientadores: Argimiro Resende Secchi
Talita Furlanetto Mendes

Porto Alegre

2005

**AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PRATOS VALVULADOS COM *DOWNCOMER*
E PRATOS *DUALFLOW* EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO INDUSTRIAIS**

por

Tito Livio Domingues

Esta dissertação foi julgada e aprovada em sua forma final
pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
para a obtenção do título de

Mestre em Engenharia Química

Área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos Químicos

Professor Argimiro Resende Secchi, Dr. Sc.
Orientador

Professora Talita Furlanetto Mendes, Dra. Sc.
Orientadora

Professor Argimiro Resende Secchi, Dr. Sc.
Coordenador do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química

Banca Examinadora:

Professora Eliôni Maria de A. Nicolaiewsky, Dra. Sc.

Professor Jorge Navaes Caldas, Dr. Sc.

Professora Keiko Wada, Dra. Sc.

Porto Alegre, 23 de maio de 2005.

DEDICATÓRIA

À minha esposa, Fernanda, pela paciência, pelo amor e estímulo, aos meus pais, pelo carinho e ensinamentos e ao meu irmão, pela amizade, dedico-lhes essa conquista como gratidão.

AGRADECIMENTOS

Agradeço

aos professores Talita e Argimiro pela paciência, disposição e orientação,
aos professores da graduação e da pós-graduação da UFRGS e do CENPETRO (ano 1996)
pelos conhecimentos transmitidos,
aos colegas da Unidade de Aromáticos, de Olefinas 1 e do Laboratório da COPESUL pelo
apoio irrestrito e pelo fornecimento de informações,
à COPESUL pelo apoio financeiro e tecnológico,
ao engenheiro Pedro Invernici pelas conversas filosóficas, teóricas e práticas sobre
colunas de destilação,
ao engenheiro José Maria Ferreira pela motivação inicial e constante ao projeto de
Mestrado,
aos engenheiros da BRASKEM – Insumos Básicos – pela troca de informações,
às bibliotecárias da COPESUL e da UFRGS pelas incansáveis buscas por artigos e
publicações,
ao engenheiro Eduardo Birnfeld pelo auxílio na detecção de estados estacionários das
colunas estudadas.

RESUMO

O principal objetivo deste trabalho é estabelecer caminhos apropriados para a estimativa da eficiência de pratos valvulados com *downcomer* e pratos *dualflow* em colunas de destilação industriais. O conhecimento da eficiência tem importância fundamental no projeto e na avaliação do desempenho de colunas de destilação. Pesquisando a literatura, pôde ser identificada uma árvore de alternativas para compor o modelo de eficiência de prato, dependendo dos modelos de transferência de massa, do modelo de distribuição das vazões de líquido e vapor sobre o prato, do modelo de arraste de líquido, do modelo de equilíbrio da mistura multi-componente, dos modelos de propriedades físicas, do modelo da altura da espuma sobre o prato e da definição de eficiência. Neste trabalho, diferentes métodos para a predição da eficiência em pratos valvulados e pratos *dualflow* foram compostos e comparados contra dados de três colunas de destilação industriais sob diferentes condições operacionais. Os modelos foram inseridos no simulador Aspen Plus 12.1, em linguagem Fortran, junto com dados geométricos dos pratos, propriedades dos fluidos e dados de operação das colunas de destilação industriais. Para cada coluna foi escolhido o melhor pacote termodinâmico pela verificação dos perfis de temperatura e composições de topo e fundo obtidos via simulação contra os valores reais correspondentes das colunas de destilação industriais. Foi feita uma modificação no parâmetro da fração de furos que estão em *jetting* no modelo hidráulico da dispersão acima do prato de Garcia (1999). Essa modificação produziu resultados melhores na predição da fração de furos em *jetting* e eficiência dos pratos *dualflow* e resultados similares aos de Garcia (1999) para a eficiência dos pratos valvulados.

Palavras-chave:

destilação fracionada - eficiência de prato - colunas de destilação.

ABSTRACT

The main objective of this work is to establish appropriated ways for estimating the efficiencies of valve trays with downcomer and dualflow trays of industrial distillation columns. The knowledge of efficiencies has fundamental importance in the design and performance evaluation of distillation columns. Searching in the literature, a tree of alternatives was identified to compose the tray efficiency model, depending on the mass transfer models, the liquid distribution and vapor flow model on the tray, the liquid drag model, the multi-component mixture equilibrium model, the physical properties models, the height of froth on the tray model and the efficiency definition. In this work, different methods to predict the efficiency in valve trays and dualflow trays were composed and compared against data from three industrial distillation columns under different operating conditions. The models were inserted in the Aspen Plus 12.1 simulator, in Fortran language, together with geometrical tray data, fluid properties and operating data of the distillation columns. For each column the best thermodynamic package was chosen by checking the temperature profile and overhead and bottom compositions obtained via simulation against the corresponding actual data of industrial columns. A modification in the parameter representing the fraction of holes in jetting, in the hydraulic model of the dispersion above the tray from Garcia (1999), was proposed. Modification produced better results in the prediction of the fraction of holes in jetting and efficiency in dualflow trays and similar results to Garcia (1999) to the efficiency in valve trays.

Key-words:

fractionated distillation - tray efficiency - distillation columns

SUMÁRIO

1 DESTILAÇÃO.....	14
1.1 HISTÓRICO.....	14
1.2 PRATOS COM ESCOAMENTO CRUZADO.....	15
1.3 PRATOS COM ESCOAMENTO CONTRACORRENTE OU <i>DUALFLOW</i>	16
1.4 EFICIÊNCIA DE PRATO.....	19
1.5 MÉTODOS PARA ESTIMATIVA DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS.....	21
1.6 OBJETIVOS DESTE TRABALHO.....	22
1.7 ESTRUTURA DO TRABALHO.....	23
2. MODELOS PARA PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PRATO.....	25
2.1 DEFINIÇÕES.....	25
2.1.1 Eficiência de ponto, E_{OG}	25
2.1.2 Eficiência de prato de Murphree (E_{MV}).....	29
2.1.3 Eficiência global da coluna (E_{OC}).....	29
2.1.4 Relação entre as eficiências.....	29
2.1.5 Obtenção da inclinação da curva de equilíbrio (m).....	30
2.1.6 Cálculo dos erros de predição.....	31
2.2 MÉTODOS EMPÍRICOS.....	31
2.2.1 Predição por interpolação de dados.....	31
2.2.2 <i>Scale-up</i> de uma coluna piloto para uma coluna comercial.....	32
2.2.3 Correlação de O'Connell (1946).....	32
2.2.4 Correlação de MacFarland, Sigmund e VanWinkle (1972).....	33
2.3 MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS.....	33
2.3.1 Método do AIChE (1958).....	34
2.3.2 Modelo de Chan e Fair (1984).....	35
2.3.3 Modelo de Zuiderweg (1982).....	37
2.3.4 Modelo de Chen e Chuang (1994).....	39
2.3.5 Modelo de Stichlmair (1978).....	40
2.3.6 Modelo de Klemola e Ilme (1996).....	43
2.3.7 Modelo de Xu et al. (1994).....	44
2.4 MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS COM MODELO HIDRODINÂMICO PARA A DISPERSÃO ACIMA DO PRATO.....	47
2.4.1 Modelo de Bennett et al. (1997).....	47
2.4.2 Modelo mecanicista de Prado (1986) / Prado e Fair (1990).....	48

2.4.3 Modelo de Garcia (1999), Garcia e Fair (2000)	61
2.4.4 Modelo de Garcia e Fair (2002)	66
3. HIDRÁULICA EM PRATOS	67
3.1 RETENÇÃO DE LÍQUIDO E VAPOR NO PRATO	67
3.1.1 Correlação de Dhulesia (1984)	69
3.1.2 Correlação de Garcia e Fair (2002)	69
3.2 FATORES DE INUNDAÇÃO (<i>FF</i>) E DE CAPACIDADE (<i>C_{SB}</i>)	70
3.2.1 Pratos valvulados	70
3.2.2 Pratos <i>dualflow</i>	71
3.3 MODELOS DE MISTURA DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO	72
3.4 MODELOS PARA ARRASTE DE LÍQUIDO E GOTEJAMENTO	75
3.4.1 Pratos valvulados	76
3.4.2 Pratos <i>dualflow</i>	77
4 METODOLOGIA PROPOSTA PARA O CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS.....	83
4.1 DIAGRAMA DE BLOCOS PARA PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA GLOBAL	84
4.1.1 Pratos valvulados	87
4.1.2 Pratos <i>dualflow</i>	89
4.2 CÁLCULO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE <i>JETTING</i> NO PRATO	89
4.3 ALGORITMO PARA CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE PRATO DE MURPHREE	91
5 VALIDAÇÃO DO MODELO	94
5.1 COLUNAS AVALIADAS	94
5.1.1 Fluxogramas simplificados de processo das colunas avaliadas.....	94
5.1.2 Modelos termodinâmicos	98
5.1.3 Estimativa das propriedades físicas	109
5.1.4 Ajuste dos balanços de massa.....	115
5.1.5 Escolha dos estados estacionários	118
5.2 COMPARAÇÃO DAS CORRELAÇÕES DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE <i>JETTING</i>	118
5.2.1 Pratos <i>dualflow</i>	119
5.2.2 Pratos valvulados.....	121
5.3 RESULTADOS DE EFICIÊNCIA GLOBAL	125
5.3.1 Fracionadora de propeno (pratos <i>dualflow</i>).....	126
5.3.2 Fracionadora de buteno-1 (pratos <i>dualflow</i>).....	129
5.3.3 Fracionadora de C6 (pratos valvulados).....	133
5.4 ANÁLISE DOS RESULTADOS DOS MODELOS.....	136
CONCLUSÕES.....	141
REFERÊNCIAS	144
OBRAS CONSULTADAS	148
APÊNDICE A – NOMENCLATURA	152
APÊNDICE B - CONDIÇÕES OPERACIONAIS E DADOS GEOMÉTRICOS DAS COLUNAS REAIS	156

APÊNDICE C - ESTADOS ESTACIONÁRIOS.....	167
APÊNDICE D – PROGRAMA EM FORTRAN	170

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Estado do desenvolvimento dos processos de separação (KELLER, 1987 apud GARCIA, 1999)	14
Figura 1.2: Pratos com escoamento cruzado (KISTER, 1992)	15
Figura 1.3: Prato <i>Superfrac Trays</i> (KOCH-GLITSCH, 2000)	16
Figura 1.4: Esquema de prato <i>dualflow</i> (STONE & WEBSTER, 1997).....	16
Figura 1.5: Desenhos diferentes de pratos (LOCKETT, 1986).....	17
Figura 2.1: Esquema do elemento diferencial da dispersão usado para definir as unidades de transferência de massa (LOCKETT, 1986)	27
Figura 2.2: Seção de uma coluna Oldershaw (KISTER, 1992).....	32
Figura 2.3: Modelo hidráulico de Bennett et al. (1997) para a dispersão acima do prato.....	47
Figura 2.4: Representação esquemática da localização das zonas de transferência de massa usada por Prado (1986) / Prado e Fair (1990)	49
Figura 2.5: Modelo de transferência de massa da dispersão acima de um prato perfurado (PRADO, 1986; PRADO e FAIR, 1990)	60
Figura 3.1: Fator de capacidade em pratos <i>dualflow</i> baseado em dados do <i>FRI</i> para coluna de 1,20 m de diâmetro (GARCIA e FAIR, 2002)	72
Figura 3.2: Perfil de concentração do componente mais volátil do vapor que sai do prato (LOCKETT, 1986)	72
Figura 3.3: Fator de arraste de líquido pelo vapor (ψ) em pratos <i>dualflow</i> , metanol/água (KASTANEK e STANDART, 1967 apud GARCIA e FAIR, 2002).....	79
Figura 3.4: Fator de desconto (ψ') devido à baixa vazão (GARCIA e FAIR, 2002)	80
Figura 4.1: Algoritmo utilizado no simulador Aspen Plus 12.1 para cálculo da eficiência de prato aparente de Murphree (E_{MV}^a ou E_{WI}).....	93
Figura 5.1: Fluxograma de processo da Fracionadora de C6	95
Figura 5.2: Fluxograma de processo da Fracionadora de buteno-1	96
Figura 5.3: Fluxograma de processo da Fracionadora de propeno	97
Figura 5.4: Volatilidades relativas obtidas por Carmichael et al. (1962).....	101
Figura 5.5: Influência de <i>FJ</i> na eficiência de ponto (E_{OG}) calculada pelo modelo de Garcia (1999) para as colunas utilizadas neste trabalho	118
Figura 5.6: Percentual volumétrico de <i>jetting</i> e bolhas grandes em função do fator F_S variando a altura do vertedouro, h_W (PRADO, 1986).....	119
Figura 5.7: Comparação entre <i>FJ</i> modificado (proposto neste trabalho) e <i>FJ</i> calculado por Prado (1986), para a coluna Fracionadora de propeno (pratos <i>dualflow</i>)	120
Figura 5.8: Comparação entre <i>FJ</i> modificado (proposto neste trabalho) e <i>FJ</i> calculado por Prado (1986), para a coluna Fracionadora de buteno-1 (pratos <i>dualflow</i>)	120
Figura 5.9: Comparação entre <i>FJ</i> modificado (proposto neste trabalho) e <i>FJ</i> calculado por Prado (1986), para a coluna Fracionadora de C6 (pratos valvulados).....	121

Figura 5.10: Percentual volumétrico de <i>jetting</i> e bolhas grandes em função do fator F_S variando o diâmetro do furo, d_H (PRADO, 1986)	123
Figura 5.11: Percentual volumétrico de <i>jetting</i> e bolhas grandes em função do fator F_S variando a fração de área perfurada do prato, ϕ (PRADO, 1986)	124
Figura 5.12: Percentual volumétrico de <i>jetting</i> e bolhas grandes em função do fator F_S variando a vazão de líquido, Q_L/L_W (PRADO, 1986)	125
Figura 5.13: Comparação da eficiência global da coluna Fracionadora de propeno com os modelos de predição	128
Figura 5.14: Influência do fator de inundação, FF , na eficiência global da coluna Fracionadora de propeno, para os diversos modelos de predição de eficiência	128
Figura 5.15: Comparação da eficiência global da coluna Fracionadora de buteno-1 com os modelos de predição	131
Figura 5.16: Influência do fator de inundação, FF , na eficiência global da coluna Fracionadora de buteno-1, para os diversos modelos de predição de eficiência	131
Figura 5.17: Exemplos de perfis gerados no simulador Aspen Plus 12.1 para a Fracionadora de buteno-1	132
Figura 5.18: Comparação da eficiência global da coluna Fracionadora de C6 com os modelos de predição	135
Figura 5.19: Influência do fator de inundação, FF , na eficiência global da coluna Fracionadora de C6, para os diversos modelos de predição de eficiência	136
Figura 5.20: Comparação entre a eficiência global calculada por Garcia (1999) modificado e valores observados das colunas reais	138
Figura 5.21: Comparação entre a eficiência global calculada por Garcia (1999) e valores observados das colunas reais	138
Figura 5.22: Comparação entre a eficiência global calculada por Chan e Fair (1984) e Xu et al. (1994) e valores observados das colunas reais	139

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1: Caso real de coluna de destilação	20
Tabela 2.1: Equações para determinação dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor e líquida	57
Tabela 2.2: Cálculo do fator Φ	63
Tabela 3.1: Correlações para estimativa da altura de líquido claro (h_{CL}).....	68
Tabela 4.1: Modelos para o cálculo do número de unidades de transferência de massa e eficiência de ponto.....	84
Tabela 4.2: Correlações para altura do líquido claro (h_{CL}).....	84
Tabela 4.3: Correlações para fator de capacidade (C_{SB}).....	84
Tabela 4.4: Modelos de mistura do líquido sobre o prato	85
Tabela 4.5: Correlações para difusividade turbulenta (De).....	85
Tabela 4.6: Correlações para fração de líquido arrastada para o prato superior (L'/L).....	86
Tabela 4.7: Correlações para gotejamento ou efeitos da baixa vazão	86
Tabela 5.1: Especificações das colunas	98
Tabela 5.2: Recomendações para escolha da equação de estado e modelos de coeficiente de atividade	99
Tabela 5.3: Perfis de temperaturas da Fracionadora de buteno-1.....	103
Tabela 5.4: Comparação entre os modelos termodinâmicos para Fracionadora de buteno-1	104
Tabela 5.5: Perfis de temperaturas da Fracionadora de propeno.....	104
Tabela 5.6: Variações dos modelos <i>UNIFAC</i>	106
Tabela 5.7: Parâmetros $A12$, $A21$ e $ALPHA12$ do modelo <i>NRTL</i>	107
Tabela 5.8: Comparação entre os modelos para a Fracionadora de C6.....	108
Tabela 5.9: Difusividades calculadas para o pseudobinário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a Fracionadora de propeno, caso D.....	111
Tabela 5.10: Difusividades calculadas para o pseudobinário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a Fracionadora de buteno-1, caso Q.....	112
Tabela 5.11: Difusividades calculadas para o pseudobinário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a Fracionadora de C6, caso J.....	112
Tabela 5.12: Sensitividade da difusividade na predição da eficiência global das colunas.....	113
Tabela 5.13: Erro no balanço de massa por componente da Fracionadora de propeno	115
Tabela 5.14: Erro no balanço de massa por componente da Fracionadora de buteno-1	116
Tabela 5.15: Erro no balanço de massa por componente da Fracionadora de C6.....	117
Tabela 5.16: Eficiências globais e composição das correntes da Fracionadora de propeno ..	127
Tabela 5.17: Eficiências globais e composição das correntes de topo e fundo da Fracionadora de buteno-1	130
Tabela 5.18: Eficiências globais e composição das correntes da Fracionadora de C6.....	134

Tabela 5.19: Comparação da eficiência global calculada pelo modelo de Garcia (1999), utilizando <i>FJ</i> de Prado (1986) e <i>FJ</i> modificado neste trabalho.....	140
Tabela B-1: Dados geométricos dos pratos da Fracionadora de propeno	156
Tabela B-2: Condições operacionais, com balanço de massa ajustado da Fracionadora de propeno	157
Tabela B-3: Composição das correntes com balanço de massa ajustado para a Fracionadora de propeno	158
Tabela B-4: Dados geométricos dos pratos da Fracionadora de buteno-1	159
Tabela B-5: Condições operacionais com balanço de massa ajustado da Fracionadora de buteno-1	160
Tabela B-6: Composição das correntes com balanço de massa ajustado da Fracionadora de buteno-1	161
Tabela B-7: Dados geométricos dos pratos da Fracionadora de C6.....	163
Tabela B-8: Condições operacionais da Fracionadora de C6 com balanço de massa ajustado	164
Tabela B-9: Composição das correntes da Fracionadora de C6 com balanço de massa ajustado	165

1 DESTILAÇÃO

1.1 HISTÓRICO

Destilação é a tecnologia dominante nos processos químicos industriais. Em todo o Mundo, cerca de 95% das separações são feitas dessa forma. Só nos Estados Unidos, existem aproximadamente 40 mil colunas de destilação, representando um investimento de capital ao redor de 8 bilhões de dólares e utilizando energia equivalente à aproximadamente 1 milhão de barris por dia de óleo cru, que representam aproximadamente 15% do total de toda energia consumida nas indústrias do Estados Unidos (ZANETTI, 1997 apud GARCIA, 1999).

A Figura 1.1 mostra que há uma correlação entre a maturidade de uso e maturidade tecnológica nos processos de separação. Sem dúvida, a destilação é a mais importante tecnologia de separação utilizada em processos industriais e, de longe, o método mais desenvolvido (GARCIA, 1999).

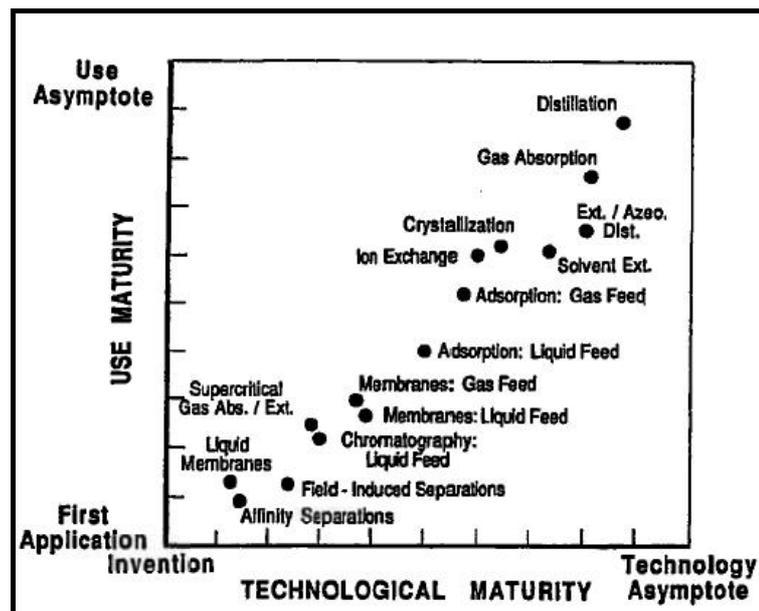


Figura 1.1: Estado do desenvolvimento dos processos de separação (KELLER, 1987 apud GARCIA, 1999)

Na indústria petroquímica, as colunas de pratos são um dos equipamentos mais usados na separação de misturas de líquido e vapor / gás (XU et al., 1994). Os pratos são classificados em dois tipos, conforme o escoamento: cruzado ou contracorrente.

1.2 PRATOS COM ESCOAMENTO CRUZADO

Em pratos com escoamento cruzado, o líquido flui entre os pratos através dos *downcomers* e o vapor flui através de furos, válvulas ou borbulhadores, como mostrado na Figura 1.2.

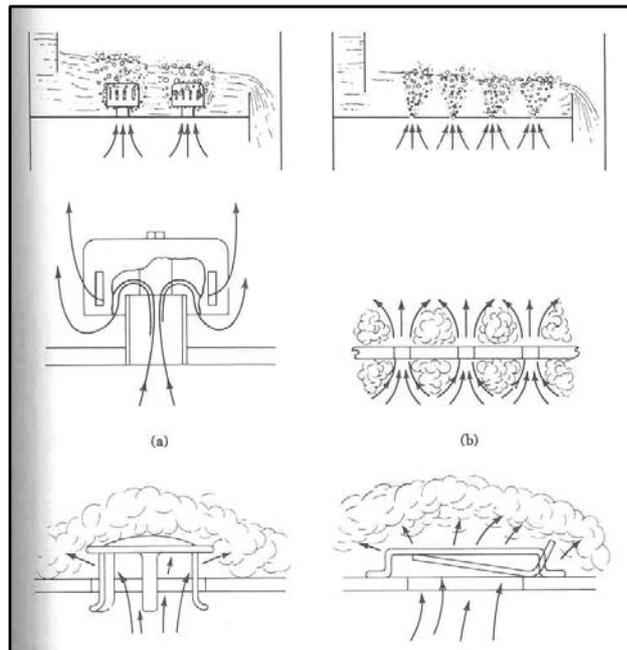


Figura 1.2: Pratos com escoamento cruzado (KISTER, 1992)

Na Figura 1.3 é mostrado um exemplo de pratos de última geração, que possuem alta capacidade, ou seja, admitem vazões internas de líquido e vapor maiores do que em pratos convencionais sem ocorrer inundação, e alta eficiência, proporcionada por promotores de escoamento na saída dos *dowcomers* e válvulas que possuem leve inclinação melhorando o escoamento do líquido sobre o prato e, conseqüentemente, a transferência de massa entre as fases vapor e líquida.



Figura 1.3: Prato *Superfrac Trays* (KOCH-GLITSCH, 2000)

1.3 PRATOS COM ESCOAMENTO CONTRACORRENTE OU *DUALFLOW*

Bem menos conhecidos, os pratos *dualflow* são aqueles onde, em contracorrente, o líquido e o vapor passam de um prato a outro através dos mesmos furos, não possuem *downcomers* e podem ter um formato ondulado. Segundo Garcia e Fair (2002) podem ser chamados de *turbogrid tray* ou *ripple tray*. As Figuras 1.4 e 1.5 mostram desenhos esquemáticos de pratos *dualflow*.

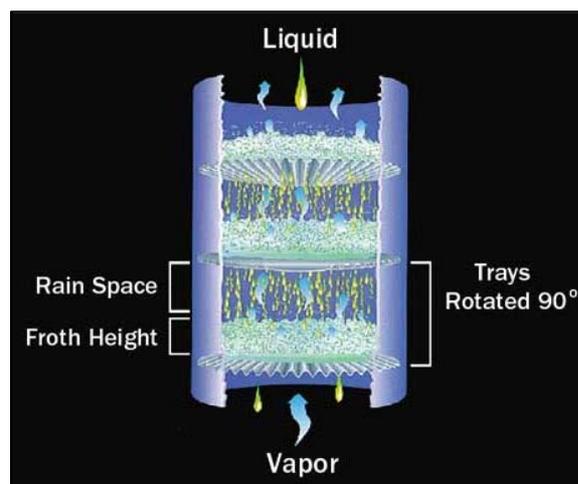


Figura 1.4: Esquema de prato *dualflow* (STONE & WEBSTER, 1997)

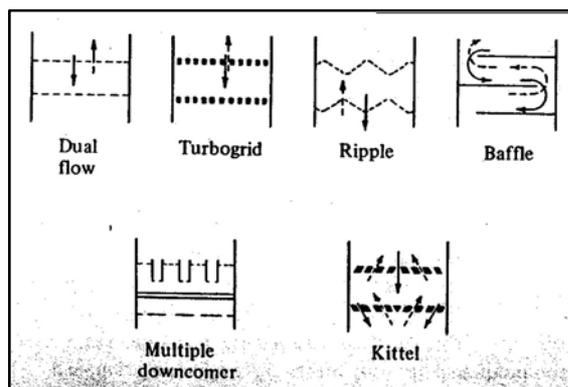


Figura 1.5: Desenhos diferentes de pratos (LOCKETT, 1986)

Os pratos *dualflow* têm maior capacidade e menor perda de carga do que pratos com *downcomers*, pois o escoamento é através de toda seção transversal da coluna (XU et al., 1994). Propiciam boa transferência de massa dos componentes entre as fases líquida e vapor, com baixo investimento de capital e são utilizados em aplicações onde há presença de sólidos e polímeros (GARCIA e FAIR, 2002).

Apesar do uso cada vez maior de pratos *dualflow* na indústria petroquímica e do petróleo, raras são as publicações sobre estimativa de eficiência desses pratos. Segundo Garcia e Fair (2002), cada vez mais os pratos *dualflow* têm substituído pratos de escoamento cruzado para aliviar problemas de incrustações severas. Segundo Baird (1999) apud Garcia e Fair (2002), na indústria onde trabalha há pratos *dualflow* instalados em 70 colunas onde os sólidos representam problema operacional. Tais argumentos têm encorajado projetistas a usarem esses pratos, chamados de autolimpantes, sem adequado suporte de modelos preditivos para eficiência (GARCIA e FAIR, 2002).

Entretanto, Weiland (2001) mostrou que pratos *dualflow* são hidraulicamente instáveis. Esta instabilidade leva a uma baixa transferência de massa e a uma faixa de operação muito estreita na qual a eficiência ótima é atingida. A fim de permitir a passagem de

líquido e vapor, grandes regiões do prato são dedicadas à vazão de líquido e outras, à passagem de vapor. Isto, obviamente, reduz o contato entre as duas fases, resultando em uma baixa transferência de massa.

Segundo Xu et al. (1994), a eficiência de pratos *dualflow* é afetada por três fatores principais: vazões internas (de líquido e vapor), propriedades físicas e fração de área perfurada (ϕ). O efeito das vazões internas é considerado através do fator superficial F_S , que é definido como o produto da velocidade superficial do gás através da área ativa do prato pela raiz quadrada da massa específica do gás e representa a quantidade de vapor nos pratos (*vapor load*), mostrado na Equação 1.1:

$$F_S = u_A \cdot \rho_G^{0,5} \quad (1.1)$$

À medida que o fator F_S aumenta, os coeficientes de transferência de massa também aumentam por causa da turbulência dos fluidos. A altura da espuma e, por isso, os tempos de contato entre o gás e o líquido aumentam para altos valores de F_S . Esta é uma característica que diferencia pratos *dualflow* de pratos com *downcomer* (XU et al., 1994), pois nos pratos com *downcomer* a turbulência é menor do que em pratos *dualflow*, à medida que F_S aumenta.

As propriedades físicas mais importantes são, principalmente, a massa específica do líquido, que afeta a altura da espuma, e as tensões superficiais, que afetam a estrutura das bolhas (XU et al., 1994). A fração de área perfurada (ϕ) é o parâmetro mais importante no projeto deste tipo de prato. Estudos mostram que quanto maior a área perfurada, maior a capacidade, mas menor a eficiência. Xu et al. (1994) e investigações prévias (KRIES e RAAB, 1979 apud XU et al., 1994) mostram que ϕ na faixa de 15 a 25% deveria ser usada para a combinação de alta capacidade e alta eficiência.

1.4 EFICIÊNCIA DE PRATO

Cada vez menos dados e métodos para estimativa da eficiência de prato são publicados pelos detentores de tecnologia de fabricação de bandejas. Além disso, os métodos existentes ainda são relativamente imprecisos (KLEMOLA e ILME, 1996).

A eficiência de prato é um fator crucial no projeto e na análise de colunas de destilação porque relaciona o número de estágios teóricos com o número de pratos reais. O procedimento normal de projeto é calcular o número de estágios teóricos com ajuda de modelos rigorosos, disponíveis nos pacotes de simuladores comerciais. A conversão para pratos reais requer a predição da eficiência local (eficiência de ponto E_{OG}), seguida pela transformação deste valor para o prato inteiro (eficiência de Murphree, E_{MV}). Deste último valor, o número requerido de pratos reais na coluna é rapidamente calculado, através da eficiência global (E_{OC}).

Enquanto muito esforço tem sido feito para a determinação do número de estágios teóricos de uma coluna, relativamente pouca atenção tem sido dada para a sua conversão para número de estágios ou pratos reais. Em parte, isto resulta do problema complexo de entendimento dos fenômenos de duas fases que existem na zona de contato, onde a transferência de massa ocorre. A predição da eficiência de ponto (E_{OG}) é um problema de transferência de massa líquido-vapor, enquanto a conversão para eficiência de prato (E_{MV}) é um problema de geometria e hidráulica do prato (GARCIA e FAIR, 2000a).

É um desafio conseguir a melhor seqüência de métodos e correlações para a estimativa da eficiência global de uma coluna, sabendo que uma operação unitária tão bem estudada quanto a destilação sofre de uma quantidade grande de problemas de predição de eficiência

não resolvidos (GARCIA e FAIR, 2000a). Este problema tem sido chamado de “a última fronteira” no desenvolvimento da tecnologia da destilação (FAIR, 1991 apud GARCIA, 1999, p. 7).

A Tabela 1.1 ilustra um caso real ocorrido em uma coluna de destilação na indústria petroquímica. Esta coluna tem como carga uma mistura multicomponente de compostos com 4 carbonos. O composto chave-leve será chamado de “LK” e o chave pesado de “HK”. O componente “LK” é o principal produto dessa Unidade.

Tabela 1.1: Caso real de coluna de destilação

	A Projeto	B Operação próxima das condições de projeto	C Operação no limite de capacidade da coluna
Recuperação do LK (%)	92	30	76
Eficiência global	0,70	0,33	0,45
Teor de HK no topo (ppm mol)	200	2900	4000
Produção de LK (t / mês)	3400	1240	3460

Pode-se concluir, comparando-se as colunas A e B da Tabela 1.1, que houve um erro de projeto dessa coluna, pois a eficiência global durante a operação ficou muito abaixo do projeto, gerando uma perda de produção mensal do produto “LK” de 2160 t / mês, deixando-se de ganhar 3,9 milhões de US\$ / ano. Estudando o problema, chegou-se à conclusão que existiram dois tipos de erros, um na parte termodinâmica e outro na predição da eficiência dos pratos. Em relação à modelagem termodinâmica dessa coluna, se, com a mesma equação de estado, fossem utilizados os parâmetros de interação binária atualizados, a eficiência global necessária, para se conseguirem as mesmas composições de topo e de fundo, teria que ser de 0,94, ou seja, a separação é mais difícil do que a prevista no projeto, no projeto previram-se menos estágios teóricos que os necessários. Em relação à predição da eficiência global feita

pelo projetista de 0,70, nota-se, na coluna C da Tabela 1.1, que, mesmo maximizando-se as vazões internas de líquido e vapor até valores próximos da inundação do prato, onde a eficiência de prato atinge seu valor máximo, a eficiência global da coluna não passou de 0,45, longe do previsto pelo projeto de 0,70. Enfim, para avaliação de novos projetos, de modificações do tipo de prato de uma coluna ou na busca do ponto ótimo de operação, é necessário um bom método para a predição da eficiência global de colunas de destilação.

1.5 MÉTODOS PARA ESTIMATIVA DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS

Métodos empíricos e semi-empíricos têm sido propostos para a determinação da eficiência de ponto e de prato. A primeira tentativa para entender a eficiência foi feita pelo AIChE (*American Institute of Chemical Engineers*) em 1958. Um esforço pioneiro para entendimento dos mecanismos de transferência de massa em pratos perfurados foi feito por Prado (1986) em sua pesquisa de doutorado. Seu trabalho elucidou a conexão entre transferência de massa e hidráulica e foi resumido em dois artigos (PRADO et al., 1987; PRADO e FAIR, 1990). Prado (1986) dividiu um prato perfurado com escoamento cruzado em zonas e aplicou, em cada uma delas, a teoria de transferência de massa dos dois filmes, considerando o tipo de regime de escoamento. O autor considerou três regiões: a região próxima dos furos, onde o gás pode estar em regime de escoamento de *jet* ou borbulhamento, a região de espuma, a qual é composta por bolhas de gás dispersas no líquido e a zona de *spray*. Contudo, seu trabalho limitou-se ao contato ar-água, não tendo sido estendido para sistemas não-aquosos.

Garcia (1999), em sua tese de doutorado, apresentou um modelo teórico fundamental para estimar a eficiência de pratos perfurados com *downcomer*. Foi um aperfeiçoamento do modelo proposto por Prado (1986), agora para sistemas não-aquosos. Até então, a correlação

de Chan e Fair (1984), desenvolvida usando o maior número de dados, era a mais recomendada em publicações (BENNETT et al., 1997).

Posteriormente, Garcia e Fair (2002) ampliaram a aplicação do modelo de zonas de Garcia (1999) para pratos *dualflow*. Até então, a tentativa mais recente de modelar a eficiência deste tipo de prato tinha sido feita por Xu et al. (1994).

1.6 OBJETIVOS DESTE TRABALHO

A proposta deste trabalho foi modificar o modelo de Garcia (1999) para permitir a predição da eficiência global de colunas de destilação reais de uma indústria petroquímica. Compararam-se os valores de eficiência global calculados pelo modelo de Garcia (1999) modificado neste trabalho com os modelos de Garcia (1999) original e de Chan e Fair (1984), no caso de coluna de pratos valvulados. Para pratos *dualflow*, aplicaram-se as modificações propostas por Garcia e Fair (2002), tanto no modelo de Garcia (1999) original quanto no modificado neste trabalho, comparando-os com o modelo de Xu et al. (1994). Por fim, em ambos os tipos de colunas, de pratos valvulados com *downcomer* e de pratos *dualflow*, compararam-se as eficiências globais calculadas através dos modelos, com as eficiências globais reais dessas colunas de destilação.

Os objetivos específicos deste trabalho foram:

a) Compilar o banco de dados de três colunas de destilação, uma de pratos valvulados e duas de pratos *dualflow*. Os dados foram restringidos a períodos de tempo considerados confiáveis. Modelar as colunas no simulador Aspen Plus 12.1. Escolher modelos termodinâmicos e métodos para estimativa das propriedades físicas.

b) Comparar as eficiências globais, perfis de temperaturas e composições de topo e de fundo reais com as obtidas com o modelo de Garcia (1999) original e propor uma nova correlação para o cálculo da fração dos furos ativos que estão em *jetting* (*FJ*).

c) Comparar o modelo de Garcia (1999) modificado em *FJ* com o modelo original de Garcia (1999) e com o modelo de Chan e Fair (1984), para pratos valvulados. Para pratos *dualflow* aplicar as modificações de Garcia e Fair (2002) no modelo de Garcia (1999) original e modificado e compará-los com o modelo de Xu et al. (1994). Comparar com os valores de eficiência global real de colunas industriais.

d) Testar a aplicabilidade dos modelos de predição de eficiência utilizados nesse trabalho para diversas condições de vazões e composições das colunas reais.

e) Implementar no software Aspen Plus 12.1 rotina para cálculo da eficiência global de colunas com pratos valvulados com *downcomer* e pratos *dualflow*, disponibilizando-as para o uso industrial.

1.7 ESTRUTURA DO TRABALHO

Além da introdução, este trabalho apresenta mais 4 capítulos. A revisão da literatura sobre modelos de predição de eficiência de colunas é abordada no Capítulo 2. Os principais parâmetros referentes à hidráulica de pratos e sua influência na eficiência dos pratos é o tema do Capítulo 3. No Capítulo 4, é mostrado um resumo esquemático em forma de fluxograma da seqüência de equações para o cálculo da eficiência global de uma coluna de destilação e é apresentada a modificação proposta no modelo base de Garcia (1999) no parâmetro *FJ* (fração dos furos que estão em *jetting*). No Capítulo 5, é mostrada a validação dessa modificação,

comparando o resultado de eficiência global obtido com o modelo de Garcia (1999) modificado nesse trabalho, com o modelo original de Garcia (1999), com outros modelos para predição da eficiência de colunas e com a eficiência global das colunas reais. Por último, são apresentadas as principais conclusões, juntamente com sugestões para trabalhos futuros.

2. MODELOS PARA PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PRATO

Neste Capítulo, é mostrado o produto da pesquisa na literatura sobre os modelos para predição da eficiência de colunas de pratos. Inicialmente, algumas definições básicas são apresentadas, assim como os métodos classificados em empíricos, teóricos ou semi-empíricos. Por fim, são apresentados os modelos hidrodinâmicos.

2.1 DEFINIÇÕES

2.1.1 Eficiência de ponto, E_{OG}

A eficiência de ponto é obtida a partir do número global de unidades de transferência de massa (N_{OG}), referido à fase vapor, usando a Equação 2.1.

$$E_{OG} = 1 - \exp(-N_{OG}) \quad (2.1)$$

Porém, inicialmente, o número global de unidades de transferência de massa é obtido a partir do número individual de unidades de transferência de massa nas fases líquida e vapor, N'_L e N_G , respectivamente:

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{\lambda}{N'_L} \quad (2.2)$$

Para a fase vapor tem-se:

$$N_G = k'_G \cdot a' \cdot t_G \quad (2.3)$$

e para a fase líquida:

$$N'_L = k'_L \bar{a} t_L \quad (2.4)$$

onde a' e \bar{a} são as áreas interfaciais por unidade de volume de gás e líquido, respectivamente; e t_L e t_G são os tempos de residência médios nas fases líquida e vapor, respectivamente.

As seguintes equações definem os coeficientes de transferência de massa baseados na teoria de transferência de massa nos dois filmes. O fluxo molar N é dado por:

$$N = k_G \cdot (y_i - y) = k_L \cdot (x - x_i) = K_{OG} (y^* - y) \quad (2.5)$$

onde y^* é a composição do vapor em equilíbrio com a composição no seio (*bulk*) da mistura líquida, que para uma linearização local da curva de equilíbrio assume a forma:

$$y^* = m \cdot x + b \quad (2.6)$$

e o equilíbrio na interface é considerado como:

$$y_i = m \cdot x_i + b \quad (2.7)$$

Combinando as Equações 2.5, 2.6 e 2.7, resulta na relação:

$$\frac{1}{K_{OG}} = \frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L} \quad (2.8)$$

A Figura 2.1 mostra a dispersão das fases vapor e líquida num prato, utilizada para descrever o número de unidades de transferência de massa. Um balanço de massa para o vapor na parte hachurada resulta:

$$G'.L_W'.dz'.dy = K_{OG} \cdot (y^* - y) \cdot a.L_W'.dz'.dh \quad (2.9)$$

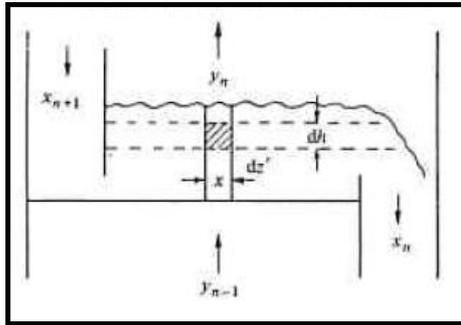


Figura 2.1: Esquema do elemento diferencial da dispersão usado para definir as unidades de transferência de massa (LOCKETT, 1986)

Ao obter a Equação 2.9 foi considerado que o vapor está em escoamento empistonado e que não há mistura horizontal de vapor. O diferencial do número de unidades de transferência é definido como a razão entre a variação da concentração do vapor num elemento diferencial e a força motriz que causa esta mudança. Assim, a partir da Equação 2.9, o número global de unidades de transferência de massa na fase vapor, N_{OG} , num elemento diferencial, é dado por:

$$N_{OG} = \int dN_{OG} = \int_0^{h_F} \frac{K_{OG} \cdot a \cdot dh}{G'} = \frac{K_{OG} \cdot a \cdot h_F}{G'} \quad (2.10)$$

ou relacionando com a equação 2.8 resulta em:

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{G'}{K_{OG} \cdot a \cdot h_F} = \frac{G'}{a \cdot h_F} \left(\frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L} \right) = \frac{G'}{k_G \cdot a \cdot h_F} + \frac{m \cdot G'}{k_L \cdot a \cdot h_F} \quad (2.11)$$

O número de unidades de transferência de massa na fase vapor é dado por:

$$N_G = \frac{k_G \cdot a \cdot h_F}{G'} \quad (2.12)$$

e o número de unidades de transferência de massa na fase líquida, N_L é dado por:

$$N_L = \frac{k_L \cdot a \cdot h_F}{m \cdot G'} \quad (2.13)$$

Substituindo-se as Equações 2.12 e 2.13 na Equação 2.11, resulta em:

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{1}{N_L} \quad (2.14)$$

ou, numa forma mais usualmente encontrada na literatura:

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{\lambda}{N'_L} \quad (2.15)$$

onde $N'_L = \frac{k_L \cdot a \cdot h_F}{L'} = N_L \cdot \lambda$.

Os números de unidades de transferência nas fases líquida (N'_L) e vapor (N_G) são obtidos através dos métodos descritos a seguir nas Seções 2.2, 2.3 e 2.4.

2.1.2 Eficiência de prato de Murphree (E_{MV})

É definida como a integração das diversas eficiências de ponto ao longo do prato, considerando o tipo de escoamento do líquido sobre o prato. Os modelos serão mostrados na Seção 3.3.

2.1.3 Eficiência global da coluna (E_{OC})

É definida como a razão entre o número de estágios teóricos (N_T) requeridos para uma determinada separação, a uma razão de refluxo especificada, e o número de pratos reais da coluna (N_R), para o mesmo refluxo.

$$E_{OC} = \frac{N_T}{N_R} \quad (2.16)$$

2.1.4 Relação entre as eficiências

A relação entre a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) e a eficiência de ponto mostrada anteriormente (E_{OG}), depende do modelo da mistura do líquido acima do prato na direção horizontal. Os modelos para fazer esta conversão serão mostrados na Seção 3.3.

A partir da eficiência de prato de Murphree pode-se estimar a eficiência da coluna utilizando a Equação 2.17:

$$E_{OC} = \frac{\ln[1 + E_{MV} \cdot (\lambda - 1)]}{\ln \lambda} \quad (2.17)$$

onde λ é a razão entre a inclinação da curva de equilíbrio (m) e a curva de operação, para cada prato:

$$\lambda = m \cdot \left[\frac{\left(\frac{M_G}{MW_G} \right)}{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right)} \right] = m \cdot \frac{G'}{L'} \quad (2.18)$$

2.1.5 Obtenção da inclinação da curva de equilíbrio (m)

Segundo Lockett (1986), para misturas binárias, a inclinação da curva de equilíbrio entre os pratos $n + 1$ e n pode ser aproximada por:

$$m_i = \frac{(y_i)_{n+1} - (y_i)_n}{(x_i)_{n+1} - (x_i)_n} \quad (2.19)$$

No caso de sistemas multicomponentes, o mais comum e geralmente o mais simplificado procedimento é o proposto por Chan e Fair (1984b), o método pseudobinário. Embora não seja rigoroso, o seu atrativo é ser relativamente simples (LOCKETT, 1986). Kister (1992) também recomenda este método, no caso de sistemas multicomponentes. Segundo Lockett (1986), o único cuidado é ter algum conhecimento para a seleção dos componentes chave-leve e chave-pesado. O método pseudobinário é descrito a seguir. Primeiramente calcula-se o teor do pseudo chave leve nas fases vapor e líquida com as Equações 2.20 e 2.21, respectivamente:

$$Y_{LK} = \frac{y_{lk}}{y_{lk} + y_{hk}} \quad (2.20)$$

$$X_{LK} = \frac{x_{lk}}{x_{lk} + x_{hk}} \quad (2.21)$$

Finalmente, para o método pseudobinário, a inclinação da curva de equilíbrio é calculada com a Equação 2.22:

$$m = \frac{(Y_{LK})_{n+1} - (Y_{LK})_n}{(X_{LK})_{n+1} - (X_{LK})_n} \quad (2.22)$$

2.1.6 Cálculo dos erros de predição

Durante todo trabalho serão utilizadas as definições dadas abaixo, apresentadas por Garcia e Fair (2000b), quando se comentar a respeito dos desvios dos resultados dos modelos em relação aos valores experimentais ou de planta:

a) % desvio = $100 \cdot (E_{OG} \text{ calculado} - E_{OG} \text{ experimental}) / E_{OG} \text{ calculado}$

b) desvio médio = $(\sum \% \text{ desvios}) / \text{número de pontos}$

c) desvio médio absoluto = $(\sum \text{ABS} (\% \text{ desvios})) / \text{número de pontos}$

2.2 MÉTODOS EMPÍRICOS

A seguir são apresentados os métodos empíricos, que são utilizados para uma rápida estimativa da eficiência global de uma coluna que está sendo analisada ou projetada.

2.2.1 Predição por interpolação de dados

Esta rota é a preferida, mas infelizmente poucos dados são publicados na literatura aberta (DRIBIKA e BIDDULPH, 1986 apud KLEMOLA e ILME, 1996). Esse método se baseia, simplesmente, em encontrar uma coluna real, onde o tipo de prato, vazões internas e os fluidos sejam parecidos com a coluna em análise ou em projeto e verificar a viabilidade de uso dos valores de eficiência da coluna ou se tais valores estão publicados. Vital et al. (1984) apresentaram uma extensiva tabulação de dados de eficiência de pratos da literatura publicada. “A interpolação de dados é um dos métodos mais confiáveis de obtenção da eficiência de prato” (KISTER, 1992, p. 378).

2.2.2 *Scale-up* de uma coluna piloto para uma coluna comercial

Kister (1992) afirma que não há redução de eficiência entre uma coluna piloto e uma coluna industrial desde que ambas as colunas operem com o mesmo fator de inundação (FF) e no mesmo regime hidráulico; a coluna piloto seja operada em refluxo total e sejam tomados cuidados com regiões estagnadas em pratos de grande diâmetro. No caso de colunas Oldershaw, ilustrada na Figura 2.2, Kister (1992) apresenta algumas recomendações adicionais. Fair et al. (1983) apud Chan e Fair (1984a) mostram que colunas Oldershaw possuem resultados confiáveis de eficiência de ponto e estes dados podem ser usados no projeto de colunas comerciais. Os dados devem ser corrigidos para os efeitos de mistura de líquido e vapor, para que a eficiência global seja obtida.

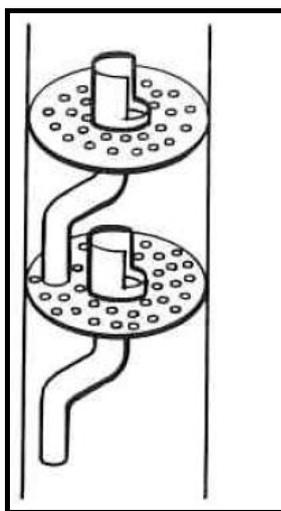


Figura 2.2: Seção de uma coluna Oldershaw (KISTER, 1992)

2.2.3 Correlação de O'Connell (1946)

A correlação de O'Connell (1946) vem sendo usada como padrão na indústria durante décadas. Essa correlação é baseada em dados de 31 colunas de plantas, incluindo separação de hidrocarbonetos, compostos clorados e álcoois. É um complemento aos dados de 54 colunas de refinarias coletados por Drickamer e Bradford (1943) apud Kister (1992).

Lockett (1986) expressou a curva de O'Connell para pratos com borbulhadores na seguinte forma:

$$E_{OC} = 9,05.(\mu_L.\alpha)^{-0,245} \quad (2.23)$$

onde a volatilidade relativa (α) e a viscosidade do líquido (μ_L) são tomadas na média aritmética da temperatura no topo e no fundo da coluna. O método prediz 90 % dos dados de eficiência com 10 % de erro, para pratos com borbulhadores. No caso de pratos perfurados e valvulados, as predições são levemente conservativas, segundo Kister (1992), que recomenda este método, pois possui razoável precisão, boa confiabilidade e simplicidade.

2.2.4 Correlação de MacFarland, Sigmund e VanWinkle (1972)

Essa correlação, usada para estimar a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), é expressa em termos de grupos adimensionais, baseada em dados binários para pratos com borbulhadores e perfurados (KISTER, 1992). O desvio médio absoluto dos valores experimentais foi de 10,6% (MACFARLAND et al., 1972).

$$E_{MV} = 6,8 \left(\frac{\sigma}{\mu_L \cdot u_A} \right)^{0,115} \left(\frac{\mu_L}{\rho_L \cdot D_L} \right)^{0,215} \left(\frac{h_W \cdot u_H \cdot \rho_G}{\mu_L} \right)^{0,1} \quad (2.24)$$

2.3 MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS

Os modelos teóricos para a predição da eficiência de ponto são baseados na teoria da transferência de massa nos dois filmes e usam uma seqüência de etapas para converter as resistências das fases líquida e gasosa para eficiência de prato (GARCIA, 1999). Quase todos os modelos são oriundos do método do AIChE (KISTER, 1992).

2.3.1 Método do AIChE (1958)

O desenvolvimento desse método foi patrocinado por companhias americanas em conjunto com o Comitê de Pesquisa do Instituto Americano dos Engenheiros Químicos e iniciado em 1952 em três universidades. É limitado a pratos com borbulhadores.

O número de unidades de transferência de massa na fase vapor é calculado pela Equação 2.25:

$$N_G = \left(0,776 + 4,57.h_w - 0,238.F_s + 104,8.\frac{Q_L}{L_w} \right) . Sc_G^{-0,5} \quad (2.25)$$

onde o número de Schmidt (Sc_G) na fase vapor é dado por:

$$Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D_G} \quad (2.26)$$

O número de unidades de transferência de massa na fase líquida é calculado pela Equação 2.27:

$$N'_L = 19700.D_L^{0,5} . (0,40.F_s + 0,17).t_L \quad (2.27)$$

e o tempo de residência médio do líquido na dispersão é dado por:

$$t_L = \frac{h_{CL} \cdot FPL \cdot L_w}{Q_L} \quad (2.28)$$

A altura de líquido claro (h_{CL}), que representa a altura da espuma sobre o prato (h_F) quando a fração volumétrica de vapor na espuma (ϵ) é igual a zero, é obtida a partir da

correlação proposta por Gerster et al. (1963) apud Lockett (1986):

$$h_{CL} = h_{CLD} + \frac{u_A \cdot \rho_G \cdot (u_H - u_A)}{\rho_L \cdot g} \quad (2.29)$$

onde

$$h_{CLD} = \alpha' h_w - \beta \cdot F_s + \gamma \cdot \frac{Q_L}{L_w} + \delta \quad (2.30)$$

e as constantes são, $\alpha' = 0,29$; $\beta = 0,0135$; $\gamma = 2,45$; $\delta = 0,040$.

“Nenhuma das correlações para o cálculo de N'_L e N_G inclui tensão superficial, σ , e o número de Schmidt é aberto a dúvidas quanto ao seu uso” (LOCKETT, 1986, p. 142). Metha e Sharma (1966) apud Lockett (1986) observaram que N_G depende de D_G , mas não de Sc_G .

“Grandes erros são reportados para o método do AIChE por diversos autores, incluindo Hughmark (1965), Chan e Fair (1984) e Biddulph e Dribika (1986)” (BENNETT et al, 1997, p.1612).

2.3.2 Modelo de Chan e Fair (1984)

Esse modelo pode ser considerado um aperfeiçoamento do método do AIChE (LOCKETT, 1986). Ele foi baseado em extensivo banco de dados para pratos perfurados, com misturas binárias de ciclohexano/n-heptano, isobutano/n-butano, etilbenzeno/estireno, metanol/água, etanol/água, ácido acético/água. Em comparação com o modelo do AIChE, este apresentou melhor ajuste aos dados experimentais, com um desvio médio absoluto de 6,27 %, contra 22,9% do AIChE. Pode ser também aplicado para pratos valvulados (CHAN e FAIR, 1984).

Neste modelo, faz-se a inclusão do fator de inundação, FF , no cálculo de N_G , o que implica que a eficiência dependa do espaçamento entre os pratos para vazões internas fixas de líquido e vapor. Isto parece não ser razoável e a presença do FF serve como uma lembrança do empirismo inerente nesta correlação (LOCKETT, 1986).

“As correlações exigem o uso de difusividades, as quais são freqüentemente difíceis de obter com razoável precisão” (KISTER, 1992, p. 375).

A correlação final obtida para o número de unidades de transferência de massa na fase vapor é:

$$N_G = (10300 - 8670.FF).FF \cdot \frac{D_G^{0,5}}{h_{CL}^{0,5}} \cdot t_G \quad (2.31)$$

onde o tempo médio de residência na fase vapor é dado por:

$$t_G = \frac{(1 - \alpha_E) \cdot h_{CL}}{\alpha_E \cdot u_A} \quad (2.32)$$

onde h_{CL} e α_E são obtidos a partir das correlações de Bennett et al. (1983) apud Lockett (1986):

$$h_{CL} = \alpha_E \left[h_W + C \left(\frac{Q_L}{L_W \cdot \alpha_E} \right)^{0,67} \right] \quad (2.33)$$

onde

$$\alpha_E = \exp \left[-12,55 \cdot \left(u_A \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right)^{0,5} \right)^{0,91} \right] \quad (2.34)$$

e

$$C = 0,50 + 0,438 \cdot \exp(-137,8 \cdot h_w) \quad (2.35)$$

Para o cálculo do número de unidades de transferência de massa na fase líquida, N_L' , utiliza-se a Equação 2.27 do modelo do AIChE, usando a Equação 2.33 para o cálculo de h_{CL} .

“A correlação de Chan e Fair (1984) foi desenvolvida usando extensivo banco de dados e é largamente recomendada. A falta de uma correlação aceitável para o parâmetro FF dificulta o uso do método quando é requerida precisão na estimativa da eficiência de ponto” (BENNETT et al., 1997, p. 1612). O modelo de Chan e Fair (1984) é recomendado para simuladores e é de fácil convergência. Foi desenvolvido para pratos perfurados, com borbulhadores e valvulados (KLEMOLA e ILME, 1997a).

2.3.3 Modelo de Zuiderweg (1982)

O modelo é baseado em dados do FRI (*Fractionation Research Institute*) e em expressões semi-teóricas para k'_G . A resistência à transferência de massa na fase líquida predita por este modelo é maior que a do modelo do AIChE, ou seja, menor valor de N'_L . As equações propostas são:

$$N_{OG} = \frac{(k'_G \cdot a \cdot h_F) / u_A}{1 + \frac{m \cdot k'_G \cdot \rho'_G}{k'_L \cdot \rho'_L}} \quad (2.36)$$

onde

$$k'_G = \frac{0,13}{\rho_G} - \frac{0,065}{\rho_G^2} \quad (1,0 \leq \rho_G \text{ (kg/m}^3\text{)} \leq 80) \quad (2.37)$$

e

$$k'_L = 2,6 \times 10^{-5} \cdot \mu_L^{-0,25} \quad (2.38)$$

ou

$$k'_L = 0,024 \cdot D_L^{0,25} \quad (2.39)$$

Ambas Equações 2.38 e 2.39 predizem, para ar/água com CO₂ como soluto, um valor de $k'_L = 1,5 \cdot 10^{-4}$ m/s. A influência da difusividade ou da viscosidade é muito baixa no valor de k'_L , deixando a escolha de qual correlação utilizar, à facilidade de encontrar a propriedade física.

Para regimes de emulsão e espuma, o produto $a \cdot h_F$ da Equação 2.36 é obtido a partir da equação seguinte:

$$a \cdot h_F = \frac{43}{\phi^{0,3}} \left(\frac{u_A^2 \cdot \rho_G \cdot h_{CL} \cdot FP}{\sigma} \right)^{0,53} \quad (2.40)$$

Para regime de *spray*:

$$a \cdot h_F = \frac{43}{\phi^{0,3}} \left(\frac{u_A^2 \cdot \rho_G \cdot h_{CL} \cdot FP}{\sigma} \right)^{0,37} \quad (2.41)$$

A inclusão da tensão superficial, σ , é uma questão ainda em aberto. Quando são usados os dados do FRI é difícil decidir qual propriedade física é a mais importante. No caso de sistemas aquosos, onde o desvio da tensão superficial tende a ser positivo, o modelo prediz baixas eficiências, ao redor de 40%, enquanto experimentalmente seria de 80%. (LOCKETT, 1986).

Para o cálculo da altura de líquido claro, h_{CL} , o modelo de Zuiderweg (1982) utiliza a correlação de Hofhuis e Zuiderweg (1979) apud Lockett (1986) mostrada abaixo:

$$h_{CL} = 0,6 \cdot (\psi \cdot p)^{0,25} \cdot h_W^{0,5} \quad (0,007 \leq d_H (m) \leq 0,01) \quad (2.42)$$

onde

$$\psi = \frac{Q_L}{L_W \cdot u_A} \cdot \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0,5} \quad (2.43)$$

“A validade da Equação 2.42 é questionável em regime *spray*, que independe de h_W ” (LOCKETT, 1986, p. 60).

2.3.4 Modelo de Chen e Chuang (1994)

Neste modelo a área interfacial é estimada a partir da teoria da dispersão e os coeficientes de transferência de massa são determinados a partir da teoria da penetração (HIGBIE, 1935 apud CHEN e CHUANG, 1994). Foram escolhidas seis misturas binárias, ciclohexano/n-heptano, metanol/n-propanol, etanol/n-propanol, ácido acético/água, benzeno/n-heptano e metanol/água para ajustar dois parâmetros, p' e q' , a partir de dados experimentais. Os valores obtidos para p' e q' foram 11 e 14, respectivamente (GARCIA, 1999). O modelo é dado por:

$$N_{OG} = \frac{\frac{p'}{\mu^{0,1} \cdot \phi^{0,14}} \left(\frac{\rho_L \cdot F_S}{\sigma^2} \right)^{1/3} \cdot D_G^{0,5} \cdot \frac{h_F}{u_A}}{m \cdot \frac{p'}{q'} \cdot \frac{\rho_G}{\rho_L} \cdot \frac{MW_L}{MW_G} \cdot \left(\frac{D_G}{D_L} \right)^{0,5} + 1} \quad (2.44)$$

A altura de líquido claro, h_{CL} , é obtida a partir da correlação de Hofhuis (1980) apud

Garcia (1999). É necessária para o cálculo da altura da espuma sobre o prato (h_F).

$$h_{CL} = 0,6 \cdot h_W^{0,5} \cdot p^{0,25} \cdot \left[\left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5} \cdot \left(\frac{A_A}{L_W} \right) \right]^{0,25} \quad (25 \leq h_W (mm) \leq 100) \quad (2.45)$$

2.3.5 Modelo de Stichlmair (1978)

Esse modelo, usado para o cálculo do número global de unidades de transferência de massa é dado pela equação abaixo:

$$N_{OG} = \frac{(k'_G \cdot a \cdot h_F) / u_A}{1 + \frac{m \cdot k'_G \cdot \rho'_G}{k'_L \cdot \rho'_L}} \quad (2.46)$$

As equações para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa, k'_G e k'_L , são baseadas na teoria da penetração de Higbie (1935) apud Lockett (1986). A correlação original é:

$$k'_G = 2 \cdot \left(\frac{D_G}{\pi \cdot \theta} \right)^{0,5} \quad (2.47)$$

que desenvolvida, abrindo-se o termo θ (tempo de contato de um elemento da interface gás-líquido), leva à:

$$k'_G = 2 \cdot \left(\frac{D_G \cdot u_A}{\pi \cdot h_F \cdot \varepsilon} \right)^{0,5} \quad (2.48)$$

Do mesmo modo para fase líquida, originalmente, tem-se:

$$k'_L = 2 \cdot \left(\frac{D_L}{\pi \cdot \theta} \right)^{0,5} \quad (2.49)$$

chegando-se em:

$$k'_L = 2 \cdot \left(\frac{D_L \cdot u_A}{\pi \cdot h_F \cdot \varepsilon} \right)^{0,5} \quad (2.50)$$

Quando $F_S/F_{Smax} < 0,7$, a área interfacial é obtida a partir de:

$$a = a_B - \left(\frac{F_S / F_{Smax}}{0,7} \right)^{0,2} \cdot (a_B^* - a_T^*) \quad (2.51)$$

onde as áreas interfaciais são dadas por:

$$a_B = 6 \cdot \left[\frac{(\rho_L - \rho_G) \cdot g}{6 \cdot \sigma} \right]^{0,5} \cdot \left(\frac{F_S}{F_{Smax}} \right)^{0,28} \quad (2.52)$$

$$a_B^* = 6 \cdot \left[\frac{(\rho_L - \rho_G) \cdot g}{6 \cdot \sigma} \right]^{0,5} \cdot (0,7)^{0,28} \quad (2.53)$$

$$a_T^* = \frac{(0,7 \cdot F_{Smax})^2}{2 \cdot \sigma \cdot \phi^2} \cdot (1 - 0,7^{0,28}) \quad (2.54)$$

Quando $F_S/F_{Smax} > 0,7$ utiliza-se:

$$a = \frac{F_S^2}{2 \cdot \sigma \cdot \phi^2} \cdot \left(1 - \left(\frac{F_S}{F_{Smax}} \right)^{0,28} \right) \quad (2.55)$$

A dificuldade de uso do modelo de Stichlmair (1978) está em prever F_{Smax} . Como consequência, a eficiência para o regime de *spray* é incorretamente prevista em muitas situações, quando $F_S/F_{Smax} > 0,7$ (LOCKETT, 1986).

A altura da espuma, h_F , é obtida das correlações abaixo:

$$h_{CL} = \alpha \cdot \left[h_W + \frac{0,49}{C_d^{0,67}} \cdot \left(\frac{Q_L}{\alpha \cdot L_W} \right)^{0,67} + \frac{125 \cdot (u_A - u_B)^2 \cdot \rho_G}{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot (1 - \alpha)^2} \right] \quad (2.56)$$

onde $C_d = 0,61$ e u_B é a velocidade de subida de uma única bolha:

$$u_B = 1,55 \cdot \left(\frac{\sigma \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot g}{\rho_L^2} \right)^{0,25} \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{\frac{1}{24}} \quad (2.57)$$

e

$$\alpha = 1 - \left(\frac{F_S}{F_{Smax}} \right)^{0,28} \quad (2.58)$$

Transformando h_{CL} para h_F :

$$\alpha = \frac{h_{CL}}{h_F} = (1 - \varepsilon) \quad (2.59)$$

2.3.6 Modelo de Klemola e Ilme (1996)

As correlações utilizadas para o cálculo do número de unidades de transferência de massa, na fase vapor e líquida, N_G e N'_L , partem do método de Chen e Chuang (1994), modificado no modo de cálculo da área interfacial, que foi usado por Zuiderweg (1982). A correlação final é mostrada na Equação 2.60:

$$N_{OG} = C_1 \left(\frac{D_G \cdot Q_L \cdot \rho_G^{0,5} \cdot \rho_L^{0,5}}{h_{CL} \cdot L_W \cdot \sigma} \right)^{0,5} \left(1 + \frac{m \cdot C_1 \cdot MW_L \cdot (D_G \cdot \rho_G)^{0,5}}{C_2 \cdot MW_G \cdot (D_L \cdot \rho_L)^{0,5}} \right) \quad (2.60)$$

As constantes C_1 e C_2 foram obtidas pelo ajuste da Equação 2.60 aos dados experimentais de Sakata e Yanagi (1979) apud Klemola e Ilme (1996) para o sistema isobutano/n-butano, obtendo-se os valores de 49,22 e 80,85, respectivamente. Fazendo-se o mesmo ajuste com o modelo de Chen e Chuang (1994) foram encontrados os valores de 5,44 e 35,02 para as constantes p' e q' , na Equação 2.44.

Aplicou-se esse modelo ajustado a uma coluna real de pratos valvulados com *downcomer*, com mistura multicomponente, onde os chaves leve e pesado eram o isobutano e n-butano, respectivamente. Obtiveram-se valores bem realistas, apesar de N_G estar mais alto (3,0) e N'_L estar muito baixo (3,0), quando comparados aos valores observados (2,1 e 7,0, respectivamente) na coluna industrial, com os chaves leve e pesado, isobutano e n-butano (KLEMOLA e ILME, 1996). A eficiência global ajustada foi de 81,6%, a eficiência de Murphree foi de 119,1% e N_{OG} de 1,71 para esta coluna real.

O modelo de Klemola e Ilme (1996) também foi testado para pratos de passe duplo em uma coluna industrial de purificação de MTBE (KLEMOLA e ILME, 1997b). A coluna era

equipada com 14 pratos de passe duplo na seção de esgotamento e 14 pratos de passe simples na seção de retificação. Os perfis de composição simulados com o modelo de eficiência de Klemola e Ilme (1997a) tiveram boa concordância com os perfis de composição medidos na coluna, indicando que a eficiência de Murphree calculada estava correta. Testou-se também o modelo em sistemas de isobutano/n-butano, ciclohexano/n-heptano e etanol/água. Foram testados também outros métodos e comparados com este conjunto de dados experimentais. Os resultados desse estudo mostraram que o modelo de Chan e Fair (1984) é o mais recomendado para diferentes sistemas.

2.3.7 Modelo de Xu et al. (1994)

Esta foi uma das primeiras tentativas bem sucedidas para estimativa da eficiência de pratos do tipo *dualflow*. Os três parâmetros de ajuste do modelo foram determinados a partir de experimentos com sistemas binários metanol/água e metanol/isopropanol em uma coluna experimental de 300 mm de diâmetro, operando com refluxo total à temperatura ambiente. A coluna continha 5 pratos *dualflow* idênticos.

Nesse tipo de prato, a altura da espuma, h_F , ou a altura de líquido claro, h_{CL} , possuem grande influência na eficiência de prato. Xu et al. (1994) desenvolveram seu próprio modelo para h_{CL} , uma equação empírica para sistemas com baixa tendência à formação de espuma. Os autores não testaram a validade de sua correlação.

$$h_{CL} = b_1 \cdot \frac{\left(\frac{M_L}{A_A}\right)^n \cdot \left(u_A \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_{AR}}\right)^{0,5}\right)^{b_2}}{\rho_L \cdot \phi^{b_3} \cdot \left(\frac{T}{1000 \cdot d_H}\right)^{0,42}} \quad (2.61)$$

onde

$$n = 0,3162 \cdot \phi^{-0,25} \quad (2.62)$$

Os autores, usando medidas experimentais da altura da espuma para sistemas metanol/água e metanol/isopropanol, encontraram para as constantes os seguintes valores $b_1 = 0,006$, $b_2 = 1,75$ e $b_3 = 1,90$.

Para transformar a altura de líquido claro (h_{CL}) em altura de espuma, h_F , aplica-se a Equação 2.63:

$$h_{CL} = h_F \cdot (1 - \varepsilon) \quad (2.63)$$

Para pratos *dualflow*, Mahendru e Hackl (1979) apud Xu et al. (1994) desenvolveram a seguinte equação para o cálculo da porosidade, ε :

$$\varepsilon = 1,0 - 0,0946 \cdot \left(\frac{u_A^2 \cdot \rho_G}{g \cdot h_{CL} \cdot \rho_L} \right)^{-0,2} \quad (2.64)$$

Os cálculos dos coeficientes de transferência de massa, k'_G e k'_L , foram feitos a partir da teoria da penetração de Higbie (1935), conforme apresentado nas Equações 2.48 e 2.50.

A área interfacial foi calculada modificando-se a equação abaixo, proposta originalmente por Bhavaraju et al. (1978) apud Xu et al. (1994):

$$a = \frac{\varepsilon \cdot (\rho_L^2 \cdot \rho_G)^{0,2} \cdot u_A^{0,4}}{\mu_G^{0,1} \cdot \sigma^{0,6}} \quad (2.65)$$

A estrutura da bolha e, assim, a área interfacial da dispersão num prato *dualflow* é fortemente dependente da fração de área perfurada, ϕ , como mostra a equação abaixo:

$$a = \frac{\varepsilon \cdot (\rho_L^2 \cdot \rho_G)^{0,2} \cdot u_A^{0,4}}{\phi^c \cdot \sigma^{0,6} \cdot \mu_G^{0,1}} = a' = \bar{a} \quad (2.66)$$

onde c é um dos três parâmetros ajustados.

Finalmente, obtiveram-se as correlações para N_G e N'_L :

$$N_G = k'_G \cdot a' \cdot t_G = C_1 \cdot \frac{\varepsilon \cdot (D_G \cdot t_G)^{0,5} \cdot (\rho_L^2 \cdot \rho_G)^{0,2} \cdot u_A^{0,4}}{(1 - \varepsilon)^{0,5} \cdot \phi^c \cdot \sigma^{0,6} \cdot \mu_G^{0,1}} \quad (2.67)$$

onde

$$t_G = \frac{h_{CL}}{(1 - \varepsilon) \cdot u_A} \quad (2.68)$$

e

$$N'_L = k'_L \cdot \bar{a} \cdot t_L = C_2 \cdot \frac{\varepsilon \cdot (D_L \cdot t_L)^{0,5} \cdot (\rho_L^2 \cdot \rho_G)^{0,2} \cdot u_A^{0,4}}{(1 - \varepsilon) \cdot \phi^c \cdot \sigma^{0,6} \cdot \mu_G^{0,1}} \quad (2.69)$$

onde

$$t'_L = \frac{h_{CL} \cdot A_A}{Q_L} \quad (2.70)$$

As áreas interfaciais a' e \bar{a} são calculadas pela Equação 2.66.

Um total de 226 medidas de eficiência foi usado para a determinação dos parâmetros c , C_1 e C_2 , com valores de ϕ iguais a 20, 28 e 37% e fator superficial (F_s) entre 0,8 e 2,4, em sistemas contendo metanol/água e metanol/isopropanol. Foram encontrados os seguintes

valores, $c = 1,32$, $C_1 = 0,27$ e $C_2 = 7,0$. O desvio médio absoluto foi de 7,1 % e 95% das medidas de eficiência de ponto concordaram com os valores observados em ± 15 %.

2.4 MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS COM MODELO HIDRODINÂMICO PARA A DISPERSÃO ACIMA DO PRATO

2.4.1 Modelo de Bennett et al. (1997)

Esse modelo, utilizado para o cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}), foi desenvolvido para pratos com escoamento cruzado e contracorrente (*dualflow*). Os autores dividiram o prato em duas regiões, uma localizada próxima ao prato (*liquid-continuous region*), com altura h_{LC} , e outra região localizada acima desta (*vapor-continuous region*), com altura h_{VC} , conforme Figura 2.3.

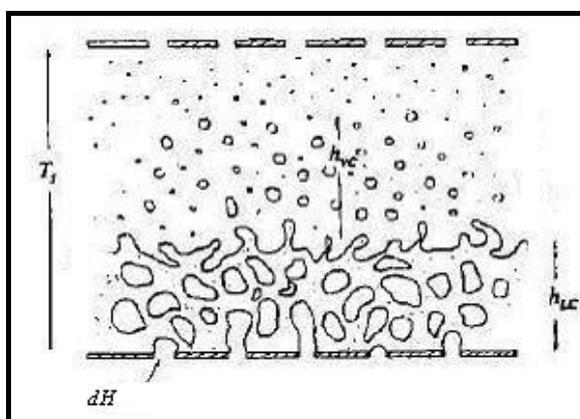


Figura 2.3: Modelo hidráulico de Bennett et al. (1997) para a dispersão acima do prato

Os autores utilizaram um banco de dados dos seguintes sistemas binários: ácido acético/água, esgotadora de amônia/água, ciclohexano/n-heptano, isobutano/n-butano. A correlação final obtida para estimar diretamente a eficiência de ponto, sem necessidade de se calcular o número global de unidades de transferência de massa, foi:

$$E_{OG} = 1 - \exp \left[\left(\frac{-0,0029}{1 + m \cdot \frac{\rho_G'}{\rho_L'} \cdot \left(\frac{D_G}{D_L} \cdot \frac{(1 - \alpha_E)}{\phi} \right)} \right) \left(\frac{\rho_G \cdot u_H \cdot h_F}{\mu_G} \right)^{0,4136} \left(\frac{h_{CL}}{d_H} \right)^{0,6074} \cdot \phi^{-0,3195} \right] \quad (2.71)$$

A altura da espuma é obtida a partir da equação abaixo:

$$h_F = h_{CL} \cdot \alpha_E \quad (2.72)$$

onde a altura do líquido claro, h_{CL} , e a fração volumétrica de líquido na espuma, α_E , são as de Bennett et al. (1983), anteriormente mostradas nas Equações 2.33 e 2.34. O desvio médio encontrado foi de 6,41%.

2.4.2 Modelo mecanicista de Prado (1986) / Prado e Fair (1990)

A função do escoamento cruzado em um prato perfurado é promover o íntimo contato entre as fases vapor e líquida e assim possibilitar a rápida transferência de massa entre as fases. A taxa de transferência é proporcional à área interfacial bem como a fatores hidrodinâmicos que promovem o transporte turbulento para e da interface. Os modelos de eficiência disponíveis atualmente têm pouca relação com a mecânica dos fluidos, e caso tenham é através de meios empíricos.

A proposta do modelo de Prado (1986) / Prado e Fair (1990) foi desenvolver um modelo de predição da eficiência baseado nas mais fundamentais considerações do mecanismo de contato entre as fases. O modelo é limitado a pratos perfurados de escoamento cruzado, mas pode ser estendido para pratos valvulados e pratos com borbulhadores. Foi desenvolvido usando o sistema ar/água.

A região de atividade dos furos (formação do *jet* e das bolhas), os tamanhos de bolhas e suas velocidades de subida e a média da porosidade (fração volumétrica de gás na espuma), foram os fatores hidráulicos considerados nesse modelo. Nenhum dos estudos feitos, até então, havia tentado relacionar o tipo de regime de escoamento e a eficiência.

A dispersão acima do prato é dividida verticalmente em três zonas. A zona do fundo, mais próxima do prato (zona de atividade dos furos) corresponde à atividade dos furos (*jetting* ou borbulhamento); a seção do meio (zona da espuma *bulk*) é composta de bolhas de gás dispersas no líquido, enquanto a zona de topo (zona de *spray*) é uma fase gasosa contínua, com gotas dispersas, como apresentado por Prado (1986) / Prado e Fair (1990) na Figura 2.4.

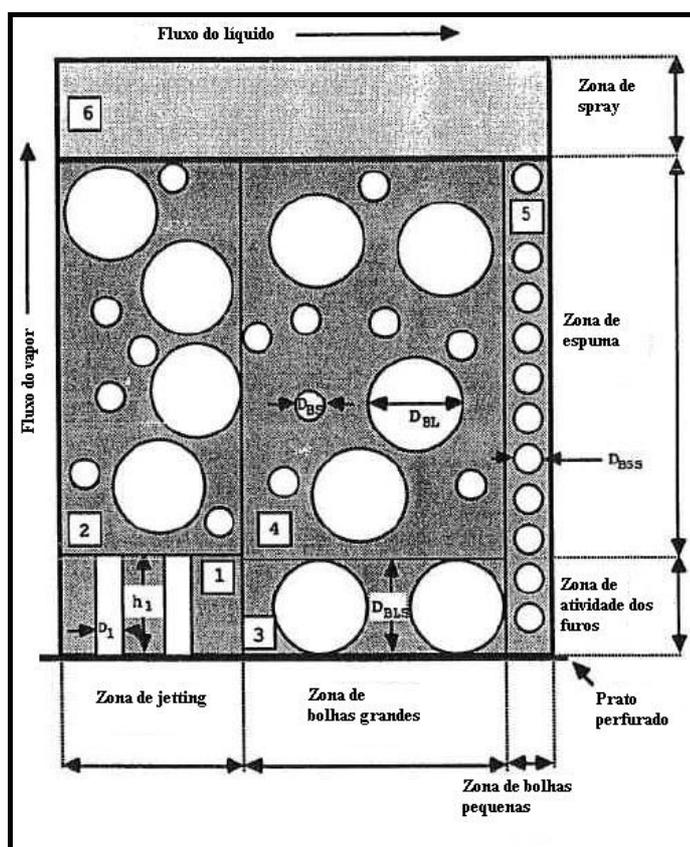


Figura 2.4: Representação esquemática da localização das zonas de transferência de massa usada por Prado (1986) / Prado e Fair (1990)

Esse modelo será descrito aqui em detalhes. Ele foi desenvolvido para o sistema ar/água e, posteriormente, Garcia (1999) estendeu sua aplicação para hidrocarbonetos, sendo este último a base do modelo modificado no presente trabalho.

Os números de unidades de transferência de massa para a fase líquida e vapor são calculados para cada uma das 6 zonas como segue:

a) Zona 1 (*jetting* no orifício)

Essa zona fica na região de atividade dos furos, onde o vapor está em regime de *jetting*.

$$N_{L1} = \frac{8 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0.5}}{\pi^{0.5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_1} \cdot t_G^{0.5} \quad (2.73)$$

e

$$N_{G1} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G1}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L1}} \cdot N_{L1} \quad (2.74)$$

onde o tempo de residência do vapor no *jetting*, t_{G1} , é obtido na divisão da altura do *jet* (h_1) pela velocidade *jet* do gás (u_J):

$$t_{G1} = \frac{h_1}{u_J} \quad (2.75)$$

A altura do *jet* (h_1) foi calculada pela correlação proposta por Lockett et al. (1979):

$$h_1 = 0,002853 \cdot \text{Re}_H \quad (2.76)$$

onde, Re_H é o número de Reynolds do escoamento do vapor através de um furo com velocidade u_H em um diâmetro d_H .

$$Re_H = \frac{d_H \cdot u_H \cdot \rho_G}{\mu_G} \quad (2.77)$$

A velocidade do *jet* (u_J) é dada por:

$$u_J = \frac{u_H \cdot d_H^2}{(1 - FLC) \cdot d_1^2} \quad (2.78)$$

onde FLC é a fração de furos coberta por líquido (não há passagem de gás).

O diâmetro médio do *jet* (d_1) foi calculado pela equação proposta por Hai (1980) apud Prado e Fair (1990):

$$d_1 = 1,1 \cdot d_H + 0,25 \cdot h_{CL} \quad (2.79)$$

A fração de furos coberta de líquido (FLC) é calculada pela equação de Prado et al. (1987).

$$FLC = 1836,97 \cdot u_H^{-1,602} \cdot \left(\frac{Q_L}{LW} \right)^{0,524} \cdot h_w^{0,292} \quad (2.80)$$

Para o cálculo de h_{CL} nos pratos *dualflow* utilizou-se, neste trabalho, a correlação de Garcia e Fair (2002) mostrada na Equação 3.6; nos pratos valvulados utilizaram-se, neste trabalho, as correlações de Dhulesia (1984) e Todd e Van Winkle (1972) apud Lockett (1986),

dadas pelas Equações 3.3, 3.4 e 3.5. Prado (1986) sugeriu, em seu trabalho, as correlações de Bennett et al. (1983), Hofhuis e Zuiderweg (1979) e Dhulesia (1984), no caso de pratos perfurados.

O coeficiente de transferência de massa na fase líquida (k'_L) é modelado usando a teoria da penetração de Higbie (HIGBIE, 1935 apud PRADO, 1986):

$$k'_{L1} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G1}} \right)^{0,5} \quad (2.81)$$

O coeficiente de transferência de massa na fase vapor (k'_G) é calculado pela equação modificada por Gilliland e Sherwood (1934) apud Prado e Fair (1990):

$$k'_{G1} = 0,046 \cdot \left(\frac{D_G}{D_1} \right) \cdot Re_1^{0,96} \cdot Sc_G^{0,44} \quad (2.82)$$

onde

$$Re_1 = \frac{d_1 \cdot u_J \cdot \rho_G}{\mu_G} \quad (2.83)$$

e

$$Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D_G} \quad (2.84)$$

b) Zona 2 (região de dispersão)

Hofer (1983), Kaltenbacher (1984) e Lockett et al. (1979) apud Prado (1986) / Prado e Fair (1990) reportaram uma distribuição bimodal das bolhas em pratos perfurados, com tamanho de 5 mm, para as bolhas pequenas (d_{BS}), e 25 mm, para as bolhas grandes (d_{BL}). A

contribuição para a transferência de massa de cada um destes dois tamanhos foi determinada pelas seguintes equações:

- Número de unidades de transferência de massa na fase líquida para bolhas pequenas e grandes, respectivamente:

$$N_{L2S} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BS}} \cdot t_{G2S}^{0,5} \quad (2.85)$$

e

$$N_{L2L} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BL}} \cdot t_{G2L}^{0,5} \quad (2.86)$$

- Número de unidades de transferência de massa na fase vapor para bolhas pequenas e grandes:

$$N_{G2S} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G2S}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L2S}} \cdot N_{L2S} \quad (2.87)$$

e

$$N_{G2L} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G2L}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L2L}} \cdot N_{L2L} \quad (2.88)$$

Os tempos de residência das bolhas pequenas (t_{G2S}) e das bolhas grandes (t_{G2L}) são:

$$t_{G2S} = \frac{(h_F - h_1)}{u_{SB}} \quad (2.89)$$

e

$$t_{G2L} = \frac{(h_F - h_1)}{u_{LB}} \quad (2.90)$$

A velocidade de subida das bolhas grandes, u_{LB} , foi obtida do balanço de massa no entorno de uma população de bolhas (HOFER, 1983 apud PRADO, 1986):

$$u_{LB} = \frac{u_A}{(1 - AJ) \cdot \varepsilon} - \frac{u_{SB} \cdot AJ}{(1 - AJ)} \quad (2.91)$$

onde a fração volumétrica de vapor na espuma (ε) é obtida a partir da Equação 3.2 no caso de pratos valvulados, ou Equação 2.64, no caso de pratos *dualflow*; AJ é a fração de bolhas pequenas presentes nas zonas 2 e 4, que é determinada mais adiante.

Prado (1986) / Prado e Fair (1990) usaram a correlação proposta por Clift et al. (1978) para o cálculo da velocidade das bolhas pequenas:

$$u_{SB} = \left[\frac{(2,14 \cdot \sigma + 0,505 \cdot \rho_L \cdot g \cdot d_{BS}^2)}{\rho_L \cdot d_{BS}} \right]^{0,5} \quad (2.92)$$

c) Zona 3

Essa zona fica na região de atividade dos furos junto ao prato e é constituída de bolhas grandes ($AJ = 0$, fração de bolhas pequenas), com os números de unidades de transferência de massa nas fases líquida e vapor dados por:

$$N_{L3} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BLS}} \cdot t_{G3}^{0,5} \quad (2.93)$$

e

$$N_{G3} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G3}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L3}} \cdot N_{L3} \quad (2.94)$$

onde

$$t_{G3} = \frac{d_{BLS}}{u_{LB3}}, \quad (2.95)$$

$$u_{LB3} = \frac{u_A}{\varepsilon} \quad (AJ = 0) \quad (2.96)$$

e

$$d_{BLS} = 0,8868 \cdot d_H^{0,8464} \cdot u_H^{0,21} \quad (2.97)$$

d) Zona 4

Essa zona fica na região de espuma e considera-se o vapor escoando em bolhas grandes e pequenas.

- Número de unidades de transferência de massa na fase líquida para bolhas pequenas e grandes:

$$N_{L4S} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BS}} \cdot t_{G4S}^{0,5} \quad (2.98)$$

e

$$N_{L4L} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BL}} \cdot t_{G4L}^{0,5} \quad (2.99)$$

- Número de unidades de transferência de massa na fase vapor para bolhas pequenas e grandes:

$$N_{G4S} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G4S}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L4S}} \cdot N_{L4S} \quad (2.100)$$

e

$$N_{G4L} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G4L}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L4L}} \cdot N_{L4L} \quad (2.101)$$

Os tempos de residência das bolhas pequenas (t_{G4S}) e das bolhas grandes (t_{G4L}) são:

$$t_{G4S} = \frac{(h_F - d_{BLS})}{u_{SB}} \quad (2.102)$$

e

$$t_{G4L} = \frac{(h_F - d_{BLS})}{u_{LB}} \quad (2.103)$$

e) Zona 5

Nessa zona o vapor se encontra na forma de bolhas pequenas e se estende da zona de atividade dos furos até a zona de espuma.

$$N_{L5} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0.5}}{\pi^{0.5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BSS}} \cdot t_{G5}^{0.5} \quad (2.104)$$

e

$$N_{G5} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G5}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L5}} \cdot N_{L5} \quad (2.105)$$

O tempo de residência das bolhas (t_{G5}) é calculado por:

$$t_{G5} = \frac{h_F}{u_{LB3}} \quad (2.106)$$

onde

$$u_{BSS} = \left[\frac{(2,14 \cdot \sigma + 0,505 \cdot \rho_L \cdot g \cdot d_{BSS}^2)}{\rho_L \cdot d_{BSS}} \right]^{0,5} \quad (2.107)$$

e

$$d_{BSS} = 1,36 \cdot d_H^{0,9857} \quad (2.108)$$

Os valores dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor (k'_G) e líquida (k'_L) para as zonas 2, 3, 4 e 5 são determinados a partir das equações da Tabela 2.1:

Tabela 2.1: Equações para determinação dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor e líquida

Tipo de bolha	Zona 2	Zona 3	Zona 4	Zona 5
Bolhas pequenas	$Sh_\infty = \frac{k'_{G2S} \cdot d_{BS}}{(k \cdot D_G)}$ (2.109)		$Sh_\infty = \frac{k'_{G4S} \cdot d_{BS}}{(k \cdot D_G)}$ (2.110)	$Sh_\infty = \frac{k'_{G5} \cdot d_{BSS}}{(k \cdot D_G)}$ (2.111)
	$Pe_G = \frac{d_{BS} \cdot u_{SB}}{k \cdot D_G}$ (2.112)		$Pe_G = \frac{d_{BS} \cdot u_{SB}}{k \cdot D_G}$ (2.113)	$Pe_G = \frac{d_{BSS} \cdot u_{BSS}}{k \cdot D_G}$ (2.114)
	$k'_{L2S} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G2S}} \right)^{0,5}$ (2.115)		$k'_{L4S} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G4S}} \right)^{0,5}$ (2.116)	$k'_{L5} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G5}} \right)^{0,5}$ (2.117)
Bolhas grandes	$Sh_\infty = \frac{k'_{G2L} \cdot d_{BL}}{(k \cdot D_G)}$ (2.118)	$Sh_\infty = \frac{k'_{G3} \cdot d_{BLS}}{(k \cdot D_G)}$ (2.119)	$Sh_\infty = \frac{k'_{G4L} \cdot d_{BL}}{(k \cdot D_G)}$ (2.120)	
	$Pe_G = \frac{d_{BL} \cdot u_{LB}}{k \cdot D_G}$ (2.121)	$Pe_G = \frac{d_{BLS} \cdot u_{LB3}}{k \cdot D_G}$ (2.122)	$Pe_G = \frac{d_{BL} \cdot u_{LB}}{k \cdot D_G}$ (2.123)	
	$k'_{L2L} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G2L}} \right)^{0,5}$ (2.124)	$k'_{L3} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G3}} \right)^{0,5}$ (2.125)	$k'_{L4L} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G4L}} \right)^{0,5}$ (2.126)	

As constantes φ e k são determinadas mais adiante.

Para $40 < Pe_G < 200$:

$$Sh_{\infty} = -11,878 + 25,879 \cdot (\log Pe_G) - 5,640 \cdot (\log Pe_G)^2 \quad (2.127)$$

Para $Pe_G > 200$:

$$Sh_{\infty} = 17,9 \quad (2.128)$$

f) Zona 6 (zona de *spray*)

A transferência de massa nessa zona não foi levada em conta, baseado no fato de que em baixos inventários no prato ela tem pouca participação na transferência de massa e em altos inventários, tal efeito é mascarado pelo arraste de líquido.

As contribuições de cada zona são agrupadas conforme descrito a seguir. As zonas 1 e 2 são agrupadas em:

$$N_{GFJ} = N_{G1} - \ln\{1 - [AJ \cdot (1 - e^{-N_{G2S}}) + (1 - AJ) \cdot (1 - e^{-N_{G2L}})]\} \quad (2.129)$$

As zonas 3 e 4 são agrupadas em:

$$N_{GFLB} = N_{G3} - \ln\{1 - [AJ \cdot (1 - e^{-N_{G4S}}) + (1 - AJ) \cdot (1 - e^{-N_{G4L}})]\} \quad (2.130)$$

Finalmente, a eficiência de ponto é calculada por:

$$E_{OG} = FJ.(1 - e^{-N_{GFJ}}) + FLB.(1 - e^{-N_{GFLB}}) + FSB.(1 - e^{-N_{GS}}) \quad (2.131)$$

onde FJ é a fração de furos em *jetting*:

$$FJ = \frac{u_A - u_{A,0}}{u_{A,100} - u_{A,0}} \quad 0 < FJ < 1 \quad (2.132)$$

em que as velocidades superficiais baseados na área ativa para 0% ($u_{A,0}$) e 100% ($u_{A,100}$) de *jetting* nos furos são dadas por:

$$u_{A,0} = 0,1 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot h_W^{0,132} \cdot d_H^{-0,26} \cdot \phi^{0,992} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,27} \quad (2.133)$$

e

$$u_{A,100} = 1,1 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot h_W^{0,132} \cdot d_H^{-0,26} \cdot \phi^{0,992} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,27} \quad (2.134)$$

FSB é a fração de furos produzindo bolhas pequenas, dada por:

$$FSB = 165,65 \cdot d_H^{1,32} \cdot \phi^{1,33} \quad (2.135)$$

e FLB é a fração de furos produzindo bolhas grandes, obtida pela diferença:

$$FLB = 1 - FJ - FSB \quad (2.136)$$

A Figura 2.5 mostra um resumo das correlações para cálculo do número de unidades de transferência de massa por zonas descritas até agora, mostrando como foram agrupadas

para cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}).

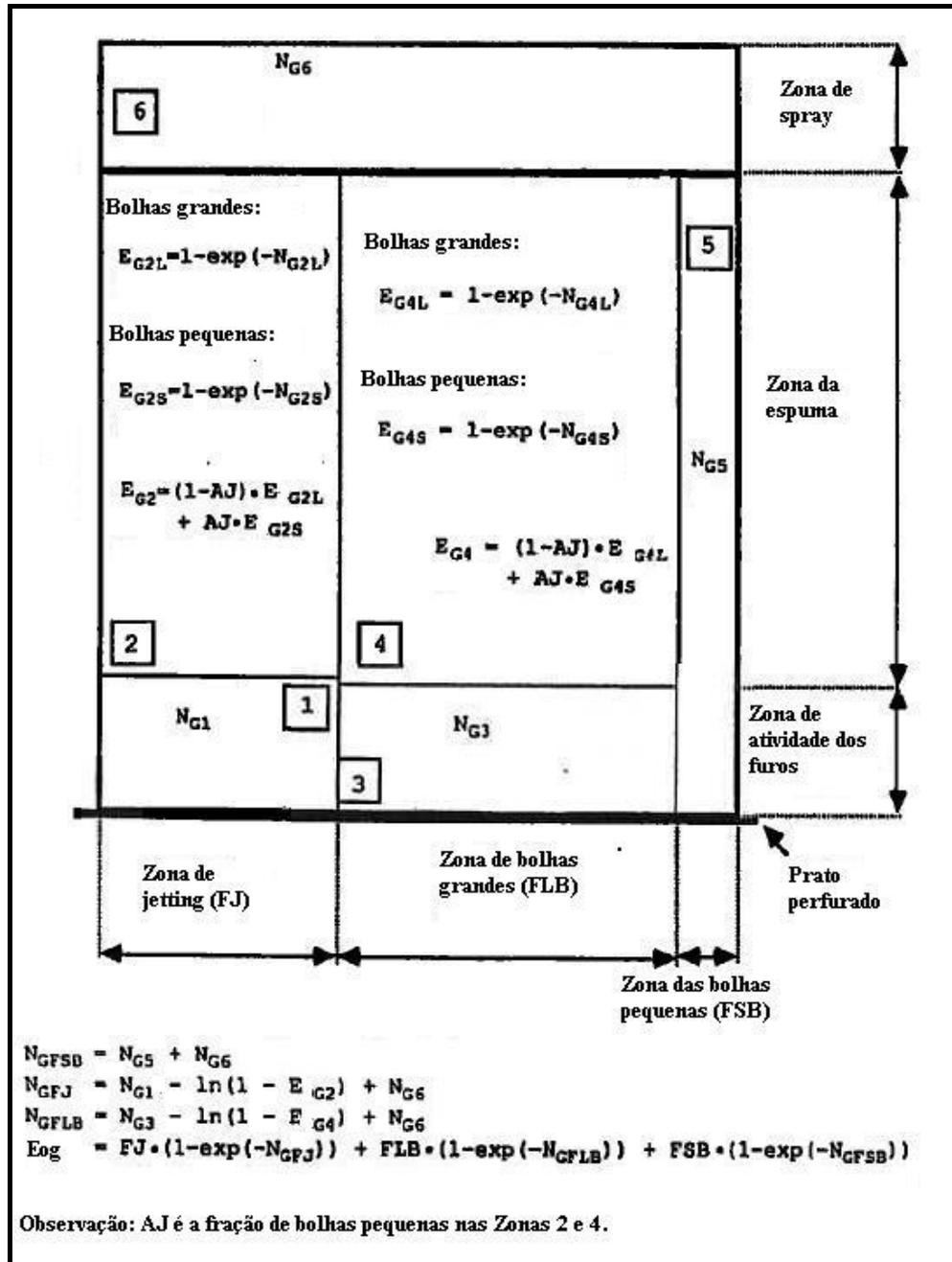


Figura 2.5: Modelo de transferência de massa da dispersão acima de um prato perfurado (PRADO, 1986; PRADO e FAIR, 1990)

O modelo exigiu a determinação de três parâmetros baseados nos dados experimentais: AJ (fração de bolhas pequenas na espuma), ϕ (ajuste do tempo de contato turbulento do líquido) e k (parâmetro que leva em conta o colapso e coalescência das bolhas). Os valores

encontrados por Prado (1986) / Prado e Fair (1990) foram: $AJ = 0,5372$, $\varphi = 2,466$ e $k = 3,318$.

Esses valores foram encontrados minimizando o desvio médio absoluto da eficiência de ponto da fase líquida e eficiência de ponto da fase vapor (E_{OG}) que foram de 4,79 % e 1,99 %, respectivamente. Contudo, eles são aplicáveis estritamente a sistemas ar / água.

2.4.3 Modelo de Garcia (1999), Garcia e Fair (2000)

O modelo fundamental de Prado (1986) / Prado e Fair (1990), limitado a sistemas ar/água, foi modificado por Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000) para permitir a predição da eficiência de ponto de sistemas orgânicos operando em regime de espuma. As correlações para os tamanhos de bolhas e para a fração de bolhas pequenas na espuma foram obtidas através da teoria do escoamento turbulento isotrópico. “Está claro que o novo modelo proporcionou um melhor ajuste do que o de Chan e Fair (1984), embora seja mais complicado para aplicar” (GARCIA e FAIR, 2000b, p.1822). O desvio médio absoluto desse modelo foi de 13,28 % contra 18,22 % do modelo de Chan e Fair (1984).

Para estender o modelo para sistemas orgânicos, foi necessário modificar certos parâmetros para levar em conta as variações das propriedades físicas em relação às condições hidrodinâmicas do prato. Estes parâmetros são:

- a) Fatores φ e k de correção da difusividade efetiva do líquido e do gás;
- b) Altura do jet, h_J ;
- c) Diâmetro médio *Sauter* das bolhas, d_{BLS} e d_{BSS} ;
- d) Velocidade de subida das bolhas pequenas, u_{SB} ;
- e) Distribuição do tamanho das bolhas, d_{BS} e d_{BL} ;
- f) Fração de bolhas pequenas na espuma, AJ ;

g) $FLC = 0$, ou seja, considerando que todos os furos do prato têm passagem de vapor.

2.4.3.1 Fatores φ e k para a correção dos coeficientes de difusão molecular do líquido e do gás

Uma análise de sensibilidade feita por Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000) com estes parâmetros mostrou o pequeno impacto no desvio médio absoluto. A fim de preservar a conveniência de estimar diretamente os coeficientes de difusão molecular das fases líquida e gasosa, foram considerados os valores de 1,00 para φ e k .

2.4.3.2 Altura do jet, h_I

A Equação 2.76, original de Prado (1990), foi substituída pela de Lockett et al. (1979):

$$h_I = 1,1 \cdot 10^{-3} \cdot d_H^{0,20} \cdot Re_H^{0,46} \quad (2.137)$$

2.4.3.3 Diâmetro médio *Sauter* das bolhas, d_{BLS} e d_{BSS}

O efeito do escoamento cruzado do líquido na formação do tamanho da bolha não foi levado em conta por Prado (1986) / Prado e Fair (1990). Garcia (1999) propôs as seguintes correlações em substituição às Equações 2.97 e 2.108:

$$d_{BLS} = \Phi \cdot 0,605 \cdot \frac{d_H^{0,84} \cdot u_H^{0,18}}{\left(\frac{Q_L}{L_W}\right)^{0,07}} \quad (2.138)$$

e

$$d_{BSS} = \Phi \cdot 0,660 \cdot \frac{d_H^{0,84} \cdot u_H^{0,085}}{\left(\frac{Q_L}{L_W}\right)^{0,08}} \quad (2.139)$$

onde Φ é um fator de correção dado por:

$$\Phi = h_{W,CSB} \cdot \mu_{L,CSB} \cdot \sigma_{CSB} \quad (2.140)$$

A Tabela 2.2 mostra os limites de validade dos parâmetros que compõem o cálculo de Φ :

Tabela 2.2: Cálculo do fator Φ

h_W	$h_W \geq 0,0254$	
	$h_{W,CSB} = 1$	(2.141)
	$0 < h_W < 0,0254$	
	$h_{W,CSB} = 8,3 \cdot h_W^{0,7}$	(2.142)
	$h_W = 0$	
	$h_{W,CSB} = 8,3 \cdot h_{CL}^{0,7}$	(2.143)
μ_L	sistemas ar/água	
	$\mu_{L,CSB} = 1$	(2.144)
	Sistemas com $\mu_L > 0,6 \times 10^{-3}$	
	$\mu_{L,CSB} = 4,13 \cdot \mu_L^{1,5}$	(2.145)
σ	$\sigma \gg 5 \times 10^{-3}$	
	$\sigma_{CSB} = 1$	(2.146)
	$\sigma \leq 5 \times 10^{-3}$	
	$\sigma_{CSB} = 3 \cdot \sigma^{0,6}$	(2.147)

Fonte: Garcia e Fair, 2000, p. 1820.

2.4.3.4 Velocidade de subida das bolhas pequenas, u_{SB}

Para sistemas não aquosos, as Equações 2.92 e 2.107 de Prado (1986) foram substituídas pelas Equações 2.149 e 2.150, calculadas usando a correlação de Grace et al. (1976) apud Garcia (1999):

$$u_{SB} = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot d_{BS}} \cdot Mo^{-0,149} \cdot (J - 0,857) \quad (2.148)$$

e

$$u_{BSS} = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot d_{BSS}} \cdot Mo^{-0,149} \cdot (J - 0,857) \quad (2.149)$$

onde

$$J = 0,94.H^{0,757} \quad (2 < H \leq 59,3), \quad (2.150)$$

$$J = 3,42.H^{0,441} \quad (H > 59,3) \quad (2.151)$$

e

$$H = \frac{4}{3}.Eo.Mo^{-0,149} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_{\text{água}}} \right)^{-0,14} \quad (2.152)$$

onde $\mu_{\text{água}} = 9,12 \cdot 10^{-4}$ kg/(m.s) à 1 atm abs. e 25 °C e:

$$Eo = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot d_{BS}}{\sigma} \quad (2.153)$$

para a média aritmética do diâmetro das bolhas pequenas nas zonas 2 e 4 (d_{BS}), ou

$$Eo = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot d_{BSS}}{\sigma} \quad (2.154)$$

para o diâmetro médio *Sauter* das bolhas pequenas na zona 5 (d_{BSS}), e:

$$Mo = \frac{g \cdot \mu_L^4 \cdot (\rho_L - \rho_G)}{\rho_L^2 \cdot \sigma^3} \quad (2.155)$$

2.4.3.5 Distribuição do tamanho das bolhas, d_{BS} e d_{BL}

Prado (1986) considerou que esta região é povoada por uma distribuição bimodal de

bolhas de 5 mm e 25 mm, d_{BS} e d_{BL} , respectivamente. Garcia (1999) aplicou as seguintes correlações:

$$d_{BS} = \frac{3,34}{(u_A \cdot g)^{0,4}} \cdot \left(\frac{\sigma}{\rho_L} \right)^{0,6} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_G} \right)^{0,1} \quad (2.156)$$

e

$$d_{BL} = d_{BS} \cdot \left[0,83 + 41,5 \cdot \left(\sigma^{0,6} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\rho_G} \right)^{0,1} \right) \right] \quad (2.157)$$

2.4.3.6 Fração de bolhas pequenas na espuma, AJ

Prado (1986) utilizou $AJ = 0,532$ baseado em ajuste aos dados experimentais para o sistema ar/água. Segundo Garcia (1999), a fração de bolhas pequenas depende das propriedades físicas das duas fases e em altas pressões esta fração é maior que para sistemas em pressão atmosférica, propondo então a seguinte correlação:

$$AJ = 1 - 0,463 \cdot \left(\frac{\sigma}{\sigma_{\text{água}}} \right)^{0,6} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_{\text{água}}} \cdot \frac{\mu_{AR}}{\mu_G} \right)^{0,1} \cdot \left(\frac{\rho_{\text{água}}}{\rho_L} \right)^{0,6} \cdot \left(\frac{\rho_{AR}}{\rho_G} \right)^{0,1} \quad (2.158)$$

As propriedades do ar e da água foram tomadas a 1 atm abs. e 25 °C:

$$\sigma_{\text{água}} = 0,07282 \text{ N/m}$$

$$\mu_{\text{água}} = 9,12 \cdot 10^{-4} \text{ kg/(m.s)}$$

$$\mu_{ar} = 1,845 \cdot 10^{-5} \text{ kg/(m.s)}$$

$$\rho_{\text{água}} = 994,7 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho_{ar} = 1,183 \text{ kg/m}^3$$

2.4.4 Modelo de Garcia e Fair (2002)

Garcia e Fair (2002) propuseram um novo modelo para prever a eficiência de pratos sem *downcomer*, chamados de *dualflow*. A última tentativa bem sucedida e reportada para modelagem da eficiência de pratos *dualflow* fora a de Xu et al. (1994). Segundo Garcia e Fair (2002), essa foi uma tentativa pioneira de modelagem de pratos *dualflow*. Futuros estudos deverão tentar mostrar as mudanças na espuma e a dinâmica da atividade dos furos.

O modelo para o cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}), desenvolvido por Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000), foi selecionado por ser o mais recente e extensivamente testado para pratos perfurados. O emprego desse modelo (GARCIA, 1999) com as modificações apresentadas por Garcia e Fair (2002), listadas abaixo, permitiu a aplicação para pratos *dualflow*:

a) $A_A = A_T$.

b) Nova correlação para (1- FLC), ou seja, a fração de furos com passagem de vapor (não cobertas de líquido):

$$(1 - FLC) = 0,4668 \cdot \left(\frac{\phi}{0,2}\right)^{0,8} \cdot \left(\frac{T_s}{0,610}\right)^{0,2} \cdot \exp\left[-0,35 \cdot \left(\frac{abs(FF \cdot 100 - 90)}{45}\right)\right] \quad (2.159)$$

c) Considerar que a eficiência na zona de spray é 1,2 x E_{OG} (eficiência de ponto modelada).

d) Nova correlação para altura de líquido claro, h_{CL} , para pratos *dualflow* (Equação 3.6).

e) Novas correlações para arraste de líquido e gotejamento em pratos *dualflow* (Equações 3.30 e 3.32).

f) Nova correlação para fator de inundação em pratos *dualflow* (Equação 3.14).

3. HIDRÁULICA EM PRATOS

Neste capítulo serão mostradas as correlações referentes à hidráulica dos pratos que complementam os modelos de predição de eficiência de pratos, apresentados no Capítulo 2.

3.1 RETENÇÃO DE LÍQUIDO E VAPOR NO PRATO

O uso de correlação que represente o mais próximo possível a altura real de líquido em um prato é fundamental para a correta determinação da eficiência do prato, pois é nessa camada que ocorrem todos os fenômenos de transferência de massa entre as fases líquida e vapor. Alturas maiores de espuma no prato levam a um aumento da eficiência do prato.

A fração volumétrica de líquido na espuma (*holdup*) é:

$$\alpha = \frac{h_{CL}}{h_F} = (1 - \varepsilon) \quad (3.1)$$

A fração volumétrica de vapor na espuma é:

$$\varepsilon = 1 - \alpha = 1 - \frac{h_{CL}}{h_F} \quad (3.2)$$

Diversos autores propuseram correlações para estimar a altura de líquido claro (h_{CL}) sobre o prato. A Tabela 3.1 apresenta as principais correlações e em qual modelo de predição de eficiência é utilizada.

Tabela 3.1: Correlações para estimativa da altura de líquido claro (h_{CL})

Autores	Correlação	Número da equação	Em uso no modelo:	Referência	Tipo de prato
Gerster et al. (1963)	$h_{CL} = h_{CLD} + \frac{u_A \cdot \rho_G \cdot (u_H - u_A)}{\rho_L \cdot g}$	(2.29)	2.3.1 AIChE (1958)	Lockett, 1986	perfurado
Stichlmair (1978)	$h_{CL} = \alpha \cdot \left[h_W + \frac{0,49}{C_d^{0,67}} \cdot \left(\frac{Q_L}{\alpha \cdot L_W} \right)^{0,67} + \frac{125 \cdot (u_A - u_B)^2 \cdot \rho_G}{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot (1 - \alpha)^2} \right]$	(2.56)	2.3.5 Stichlmair (1978)	Lockett, 1986	perfurado e <i>bubble cap</i>
Hofhuis e Zuiderweg (1979)	$h_{CL} = 0,6 \cdot (\psi \cdot p)^{0,25} \cdot h_W^{0,5}$	(2.42)	2.3.3 Zuiderweg (1982)	Lockett, 1986	perfurado
Hofhuis (1980)	$h_{CL} = 0,6 \cdot h_W^{0,5} \cdot p^{0,25} \cdot \left[\left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5} \cdot \left(\frac{A_A}{L_W} \right) \right]^{0,25}$	(2.45)	2.3.4 Chen e Chuang (1994)	Garcia, 1999	
Bennett et al. (1983)	$h_{CL} = \alpha_E \cdot \left[h_W + C \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W \cdot \alpha_E} \right)^{0,67} \right]$	(2.33)	2.3.2 Chan e Fair (1984)	Lockett, 1986	perfurado
Dhulesia (1984)	$h_{CL} = 0,42 \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W \cdot u_A} \cdot \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0,5} \right)^{0,33} \cdot h_W^{0,67}$	(3.3)	2.4.3 Garcia (1999)	Lockett, 1986	Prato valvulado
Xu et al. (1994)	$h_{CL} = b_1 \cdot \frac{\left(\frac{M_L}{A_A} \right)^n \cdot \left(u_A \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_{AR}} \right)^{0,5} \right)^{b_2}}{\rho_L \cdot \phi^{b_3} \cdot \left(\frac{T}{1000 \cdot d_H} \right)^{0,42}}$	(2.61)	2.3.7 Xu et al. (1994)	Xu et al. (1994)	<i>dualflow</i>
Garcia e Fair (2002)	$h_{CL} = b_1 \cdot \frac{M_L^n \cdot \left(u_A \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5} \right)^{b_2}}{\rho_L \cdot \phi^{b_3} \cdot \left(\frac{T}{1000 \cdot d_H} \right)^{0,42}}$	(3.6)	2.4.3 Garcia (1999)	Garcia e Fair (2002)	<i>dualflow</i>

As correlações propostas por Dhulesia (1984), para pratos valvulados, e por Garcia e Fair (2002), para pratos *dualflow*, serão mais exploradas nas seções seguintes, pois foram utilizadas no modelo de Garcia (1999) modificado neste trabalho.

3.1.1 Correlação de Dhulesia (1984)

A correlação de Dhulesia (1984) apud Lockett (1986) tem razoável concordância com dados experimentais e é recomendada para pratos valvulados (LOCKETT, 1986). Esta correlação foi escolhida para ser utilizada no modelo de Garcia (1999) para pratos valvulados. Foi obtida a partir de pratos valvulados *Glitsch-VI*, em sistema ar/água.

$$h_{CL} = 0,42 \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W \cdot u_A} \cdot \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0,5} \right)^{0,33} \cdot h_W^{0,67} \quad (3.3)$$

A altura da espuma, h_F , foi obtida a partir da correlação de Todd e Van Winkle (1972) apud Lockett (1986):

$$h_F = 0,076 + \frac{32,6 \cdot F_S^2}{(\rho_L - \rho_G)} + 0,83 \cdot h_{CLD} \quad (3.4)$$

onde

$$h_{CLD} = h_{CL} - \frac{u_A \cdot \rho_G \cdot (u_H - u_A)}{\rho_L \cdot g} \quad (3.5)$$

3.1.2 Correlação de Garcia e Fair (2002)

Utilizada para adaptar o modelo de Garcia (1999) para pratos *dualflow*. Foram feitas algumas modificações no modelo de Xu et al. (1994), apresentado na Equação 2.61, adaptadas para o banco de dados do FRI (*Fractionation Research Institute*).

$$h_{CL} = b_1 \cdot \frac{M_L^n \cdot \left(u_A \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5} \right)^{b_2}}{\rho_L \cdot \phi^{b_3} \cdot \left(\frac{T}{1000 \cdot d_H} \right)^{0,42}} \quad (3.6)$$

onde $b_1 = 0,01728$, $b_2 = 1,0$ e $b_3 = 1,50$ e

$$n = 4,3 \cdot \phi^{1,5} \quad (3.7)$$

3.2 FATORES DE INUNDAÇÃO (FF) E DE CAPACIDADE (C_{SB})

Segundo Fair (1961) apud Lockett (1986), a velocidade de inundação do prato (u_F) é calculada por:

$$u_F = C_{SB} \cdot \left(\frac{\sigma}{0,02} \right)^{0,2} \cdot \left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G} \right)^{0,5} \cdot \left(\frac{\phi}{0,1} \right)^{0,44} \quad (3.8)$$

3.2.1 Pratos valvulados

O fator de inundação do prato (FF) é dado por:

$$FF = \frac{u_N}{u_F} \quad (3.9)$$

onde a velocidade superficial do vapor baseada na área *net* do prato ($A_N =$ área total descontada da área de um *downcomer*) é dada por:

$$u_N = \frac{Q_G}{A_N} \quad (3.10)$$

Segundo a correlação de Fair (1961) e Treybal (1968) apud Lockett (1986), o fator de capacidade do prato é dado por:

$$C_{SB} = (0,00744.T_S + 0,0117).(\log FP^{-1}) + 0,0304.T_S + 0,0153 \quad (3.11)$$

onde FP é um parâmetro de fluxo dado por:

$$FP = \frac{M_L}{M_G} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5} \quad (3.12)$$

3.2.2 Pratos *dualflow*

O fator de inundação do prato (FF) é dado por:

$$FF = \frac{u_A}{u_F} \quad (3.13)$$

onde u_A é a velocidade superficial do vapor baseada na área ativa (A_A) que no caso de pratos *dualflow* é igual à área total do prato (A_T).

Garcia e Fair (2002) apresentaram curvas relacionando C_{SB} versus FP . Neste trabalho, fez-se uma regressão polinomial de segunda ordem e obteve-se a Equação 3.14, para $\phi = 0,19$. Garcia e Fair (2002) apresentaram também correção para o espaçamento entre os pratos, T_S , como mostrado na Equação 3.14.

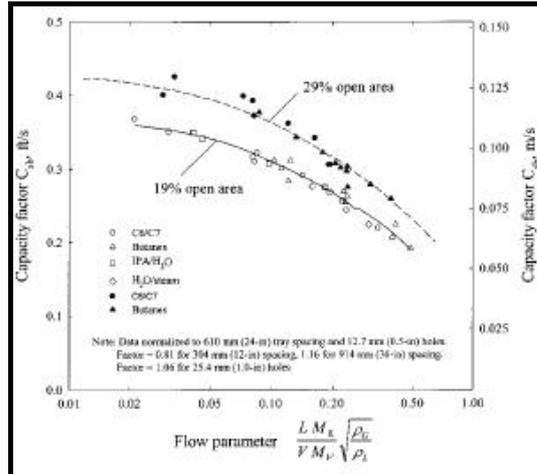


Figura 3.1: Fator de capacidade em pratos *dualflow* baseado em dados do *FRI* para coluna de 1,20 m de diâmetro (GARCIA e FAIR, 2002)

$$C_{SB} = (0,1317.FP^2 - 0,1747.FP + 0,1124).(0,6649.T_s + 0,5667) \quad (3.14)$$

3.3 MODELOS DE MISTURA DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO

Em geral, nos pratos com escoamento cruzado, o valor da eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) é maior do que o da eficiência de ponto (E_{OG}). O líquido acima dos pratos nunca é perfeitamente misturado na direção horizontal do prato e um gradiente de concentração é estabelecido no líquido que se move ao longo do prato. Por sua vez, isto causa um gradiente de concentração no vapor que deixa o prato. A Figura 3.2 ilustra este efeito:

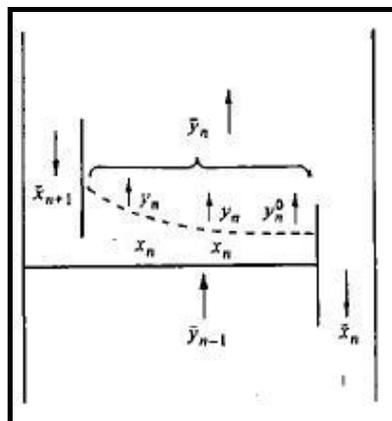


Figura 3.2: Perfil de concentração do componente mais volátil do vapor que sai do prato (LOCKETT, 1986)

A equação abaixo define a eficiência de prato de Murphree, baseada na composição do vapor:

$$E_{MV} = \frac{\bar{y}_n - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}}, \quad y_n^* = m\bar{x}_n + b \quad (3.15)$$

e, localmente, na saída do líquido do prato, a eficiência de ponto (E_{OG}) é dada por:

$$E_{OG} = \frac{y_n^0 - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}} \quad (3.16)$$

Sabendo que $\bar{y}_n > y_n^0$, então $E_{MV} > E_{OG}$.

Em circunstâncias favoráveis, E_{MV} pode exceder 100 % (LOCKETT, 1986; KISTER, 1992). Há um gradiente de concentração no líquido e \bar{x}_n na saída do prato é menor do que x_n no prato. Isto reduz y_n^* abaixo de \bar{y}_n , neste caso, E_{MV} excede 100 %.

Lewis (1936) apud Lockett (1986) foi o primeiro a determinar relações quantitativas entre E_{MV} e E_{OG} . Os três casos considerados por Lewis são:

a) Caso 1: Vapor está completamente misturado no prato e o líquido flui na mesma direção em todos os pratos.

b) Caso 2: Vapor não está misturado nos pratos e o líquido flui na mesma direção em todos os pratos.

c) Caso 3: Vapor não está misturado nos pratos e o líquido flui em direções alternadas nos sucessivos pratos.

O modelo de mistura simples para o Caso 1 de Lewis foi escolhido devido à facilidade de solução das equações. A correlação proposta por Lewis para o Caso 1 é mostrada na Equação 3.20 e estima a eficiência de prato máxima que pode ser alcançada. Na realidade, a eficiência de prato de Murphree cai um pouco do valor máximo devido à mistura do líquido, ao escoamento não uniforme de líquido e vapor através do prato e aos efeitos do arraste e gotejamento do líquido. Lewis propôs um modelo matemático que leva em conta estes efeitos, mas considerou que não há arraste ou gotejamento de líquido.

Segundo Ilme e Aittamaa (2003), o número de Pe determina o tipo de mistura de líquido sobre o prato. Conforme o tipo de mistura de líquido, Lewis (1936) apud Lockett (1986) propôs as seguintes correlações:

a) $Pe = 0$ mistura completa do líquido sobre o prato (*dualflow*)

$$E_{MV} = E_{OG} \quad (3.17)$$

b) $0 < Pe < 20$ mistura parcial

$$\frac{E_{MV}}{E_{OG}} = \frac{1 - [e^{-(\eta+Pe)}]}{(\eta+Pe) \left[1 + \frac{(\eta+Pe)}{\eta} \right]} + \frac{e^\eta - 1}{\eta \left[1 + \frac{\eta}{(\eta+Pe)} \right]} \quad (3.18)$$

onde

$$\eta = \frac{Pe}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot E_{OG}}{Pe}} - 1 \right] \quad (3.19)$$

c) $Pe > 20$ escoamento empistonado (*plug flow*)

$$E_{MV} = \frac{(e^{\lambda \cdot E_{OG}} - 1)}{\lambda} \quad (3.20)$$

onde

$$\lambda = m \cdot \left[\frac{\left(\frac{M_G}{MW_G} \right)}{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right)} \right] \quad (3.21)$$

e

$$Pe = \frac{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right) \cdot d_c}{L_w \cdot h_{CL} \cdot \left(\frac{\rho_L}{MW_L} \right) \cdot De} \quad (3.22)$$

Existem diversos modelos mencionados na literatura para o cálculo da difusividade turbulenta (eddy) (De). Lockett (1986) recomendou a correlação de Molnar (1974) apud Lockett (1986) como sendo a mais apropriada para pratos valvulados.

$$De = \left[0,0005 + 0,001285 \cdot u_A + 6,32 \cdot \left(\frac{Q_L}{L_w} \right) + 0,312 \cdot h_w \right]^2 \quad (3.23)$$

3.4 MODELOS PARA ARRASTE DE LÍQUIDO E GOTEJAMENTO

O arraste de líquido para o prato superior pelo vapor que está subindo através dos pratos provoca um reciclo interno de líquido, ocasionando redução da eficiência de prato.

3.4.1 Pratos valvulados

Lockett (1986) chamou a eficiência de prato corrigida pelos efeitos de arraste de líquido e gotejamento, de eficiência aparente, E_{MV}^a . O modelo clássico que leva em conta o efeito do arraste de líquido foi desenvolvido por Colburn (1936) apud Lockett (1986):

$$E_{MV}^a = \frac{E_{OG}}{1 + \left(\frac{L'}{L}\right) \cdot E_{OG}} \quad (3.24)$$

Uma conveniente aproximação é substituir E_{OG} por E_{MV} na Equação 3.24 e estimar E_{MV} sem levar em conta o arraste de líquido e gotejamento. Tal aproximação não tem qualquer fundamento teórico, contudo é um artifício adequado e superestima levemente E_{MV}^a comparado com métodos rigorosos (LOCKETT, 1986). Sendo assim, a Equação 3.24 é reescrita para:

$$E_{MV}^a = \frac{E_{MV}}{1 + \left(\frac{L'}{L}\right) \cdot E_{MV}} \quad (3.25)$$

Zuiderweg (1982) desenvolveu uma correlação para estimar a fração de líquido arrastada em relação ao total de líquido descendo pela coluna, (L'/L):

$$\frac{L'}{L} = 1.10^{-8} \cdot \left(\frac{h_B}{T_S}\right)^3 \cdot \left(\frac{u_H}{(Q_L / A_A)}\right)^2 \quad (3.26)$$

onde h_B é a altura do leito para regime *spray*, dada por:

$$h_B = h_{CL} \cdot \left\{ 265 \cdot \left[\frac{u_A}{(g \cdot h_{CL})^{0.5}} \cdot \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0.5} \right]^{1.7} + 1 \right\} \quad (3.27)$$

O fluxo de gotejamento (*weeping*) foi definido por Lockett e Banik (1984) apud Lockett (1986) como:

$$\begin{aligned} \text{Fluxo de gotejamento} &= \text{vazão de gotejamento (m}^3\text{/s)} / A_H \text{ (m}^2\text{)} \\ &= 0,020 \cdot Fr_h^{-1} - 0,030 \end{aligned} \quad (3.28)$$

O número de *Froude* (Fr_h) é definido por:

$$Fr_h = u_H \cdot \left(\frac{\rho_G}{g \cdot h_{CL} \cdot (\rho_L - \rho_G)} \right)^{0,5} \quad (3.29)$$

Nos modelos de cálculo de eficiência desenvolvidos neste trabalho não se incluiu o impacto do gotejamento em pratos valvulados na eficiência de prato, pois “[...] não há uma equação convenientemente simples análoga à de Colburn (1936), mostrada na Equação 3.25, para determinar a eficiência aparente (E_{MV}^a) sob condições de gotejamento” (LOCKETT, 1986, p. 175). Neste trabalho, apenas se estimou o fluxo de gotejamento, que se espera ser muito baixo ou nulo no caso de pratos valvulados.

3.4.2 Pratos *dualflow*

No caso de pratos *dualflow*, Garcia e Fair (2002) apresentaram correlações para o arraste de líquido e para o gotejamento aparente de líquido. Nestas correlações, a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) é corrigida para o efeito do arraste, resultando em uma eficiência

E_w , que é posteriormente corrigida para o efeito de gotejamento, resultando na eficiência E_{w1} . “Para interpretar a perda de eficiência a baixas vazões, aproxima-se por um arraste de líquido reverso, mesmo sabendo-se que não há reciclo” (GARCIA e FAIR, 2002, p. 1635). Denomina-se gotejamento aparente pois como os pratos *dualflow* não possuem *downcomer*, o líquido desce obrigatoriamente pelos furos. A perda de eficiência devido ao gotejamento aparente é quando, em baixas vazões internas de líquido, há uma perda da altura de espuma, alguns furos têm fluxo intermitente de líquido e vapor e o tempo de residência de contato entre líquido e vapor diminui.

A relação entre a eficiência de Murphree e a eficiência corrigida para o arraste de líquido é mostrada na equação abaixo:

$$E_w = \frac{E_{MV}}{1 + E_{MV} \cdot \Psi / (1 - \Psi)} \quad (3.30)$$

onde ψ é o fator de arraste de líquido pelo vapor em pratos *dualflow*, que é função linear do fator de inundação (FF). Para $\phi = 18,2\%$ é mostrada na Figura 3.3 e dada por:

$$\Psi = 1,9771.FF - 1,4857 \quad (3.31)$$

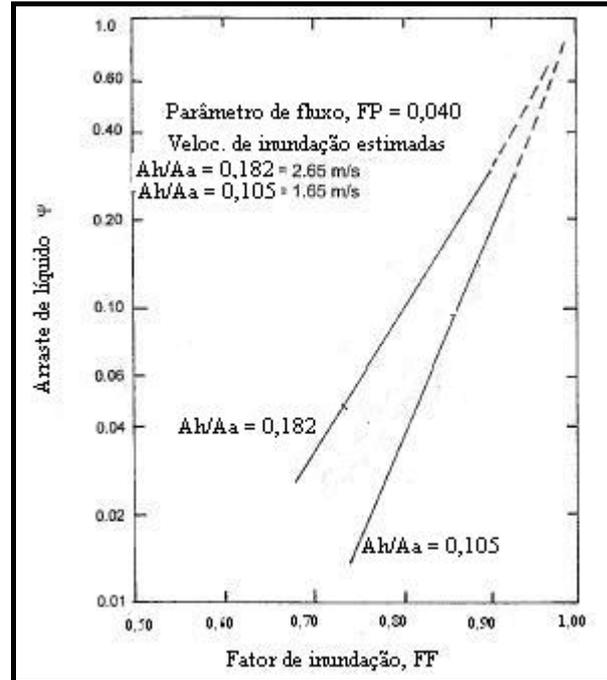


Figura 3.3: Fator de arraste de líquido pelo vapor (ψ) em pratos *dualflow*, metanol/água (KASTANEK e STANDART, 1967 apud GARCIA e FAIR, 2002)

Para inclusão do efeito do gotejamento aparente, utiliza-se a Equação 3.32:

$$E_{w1} = \frac{E_w}{1 + E_w \cdot \Psi' / (1 - \Psi')} \quad (3.32)$$

onde ψ' é a equação da reta (Equação 3.33) obtida a partir da curva ψ' versus FF para $\phi = 18-20\%$ e $d_H = 12,7$ mm, mostrada na Figura 3.4.

$$\Psi' = -0,9333.FF + 0,94 \quad (3.33)$$

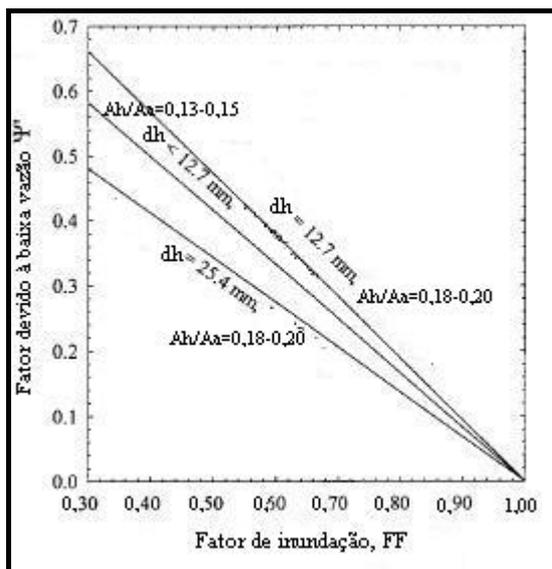


Figura 3.4: Fator de desconto (ψ') devido à baixa vazão (GARCIA e FAIR, 2002)

No Capítulo 2 foi apresentado um histórico das correlações de predição da eficiência de ponto (E_{OG}), mostrando-se os métodos mais utilizados e publicados na literatura. Neste trabalho, não se esgotaram todos os modelos existentes, mas os métodos e correlações mostrados até aqui são oriundos de publicações feitas pelas instituições e autores mais conceituados e citados, quando o assunto é destilação. Os métodos empíricos de O'Connell (1946) e MacFarland et al. (1972) são de fácil e rápida utilização, não necessitando de uma rotina de cálculo complexa, mas possuem baixa precisão, servindo apenas para uma idéia aproximada da eficiência da coluna. Em 1958, um grupo de engenheiros químicos ligados ao Instituto Americano de Engenharia Química (AIChE) criou o primeiro método que levou em conta os dados geométricos do prato, vazões internas de líquido e vapor e propriedades físicas dos componentes. Desde então, diversos modelos tem sido propostos, como o modelo clássico de Chan e Fair (1984), a nova geração de modelos que levam em conta a hidrodinâmica da dispersão acima do prato de Prado (1986) / Prado e Fair (1990) e Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000), até modelos recentes para os novos pratos *dualflow*, como as modificações propostas por Xu et al. (1994) e Garcia e Fair (2002).

No Capítulo 3, mostraram-se as correlações para cálculo de alguns parâmetros importantes que estão inseridos nos modelos de eficiência, como a altura de líquido sobre o prato (h_{CL}), fator de inundação do prato (FF), difusividade turbulenta (De), a transformação de eficiência de ponto (E_{OG}) para eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) e desta para eficiência, corrigidas levando em conta os efeitos de arraste de líquido e gotejamento (E_{MV}^a , E_{WI}). No caso de pratos *dualflow*, não havia muitas opções de correlações para os parâmetros citados acima, a única e mais recente publicação foi feita por Garcia e Fair (2002). Já no caso de pratos valvulados, para h_{CL} , cada autor propôs seu modelo ou indicou o melhor modelo a ser utilizado. Para os demais parâmetros, foram escolhidas aquelas correlações mais utilizadas pelos autores ou que foram desenvolvidas especificamente para pratos valvulados.

A escolha dos modelos para estimativa da eficiência de ponto (E_{OG}) e das correlações para altura do líquido claro (h_{CL}), mistura do líquido sobre o prato, arraste de líquido e gotejamento, entre outras apresentadas neste trabalho (difusividade turbulenta, De , fator de inundação, FF , método pseudobinário) exigiu uma pesquisa aprofundada. Foram consultados diversos artigos, livros, fabricantes de bandejas e simuladores comerciais, visando a escolha dos modelos e correlações mais atualizados, com maior precisão e mais utilizados, para cada tipo de bandeja, por autores reconhecidos na área de eficiência de bandejas.

Após o término da pesquisa na literatura, notou-se que a instituição que é vanguarda em pesquisas sobre eficiência de bandejas é a Universidade de Austin, nos Estados Unidos, com autores reconhecidos como Fair, Prado, Garcia, Chan e parcerias com fabricantes de bandejas como a Koch-Glitsch. Mas outros centros de excelência, como a Universidade de Cambridge, na Inglaterra, Universidade de Helsinki, na Finlândia, Universidade de Delft, na Holanda, e universidades da China, também possuem excelentes publicações. Outras

publicações são oriundas dos fabricantes de bandejas, como Koch-Glitsch, Sulzer, Shell e UOP, por vezes escassas em informações, mas com vanguarda tecnológica em fabricação de bandejas. Com toda essa diversidade de fontes de publicações, um trabalho amplo de pesquisa teve de ser feito para se chegar ao conjunto de correlações para estimativa da eficiência global das colunas, apresentado neste trabalho.

A seguir, no Capítulo 4, é mostrado um resumo, na forma de diagrama de blocos, dos modelos de predição da eficiência de ponto apresentados no Capítulo 2 e também dos demais parâmetros apresentados no Capítulo 3, explicando a escolha daqueles que são utilizados neste trabalho.

4 METODOLOGIA PROPOSTA PARA O CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS

A idéia deste capítulo é organizar os métodos de eficiência do Capítulo 2 e as correlações do Capítulo 3 na mesma seqüência em que foram utilizadas neste trabalho no simulador Aspen Plus 12.1, na programação em Fortran 77, mostrada no Apêndice D. No diagrama dado a seguir são apresentados os modelos e as correlações, pelo nome do autor, e ao final deste capítulo, mostra-se somente o conjunto de métodos e correlações utilizados neste trabalho, separando pratos valvulados com *downcomer* de pratos *dualflow*. Não foi objetivo deste trabalho testar todas as combinações possíveis de modelos para o cálculo de eficiência, por isso se o leitor / usuário quiser testar outro modelo ou correlação, basta apenas inserir na programação em Fortran 77, mostrada no Apêndice D, na mesma seqüência apresentada no diagrama a seguir.

4.1 DIAGRAMA DE BLOCOS PARA PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA GLOBAL

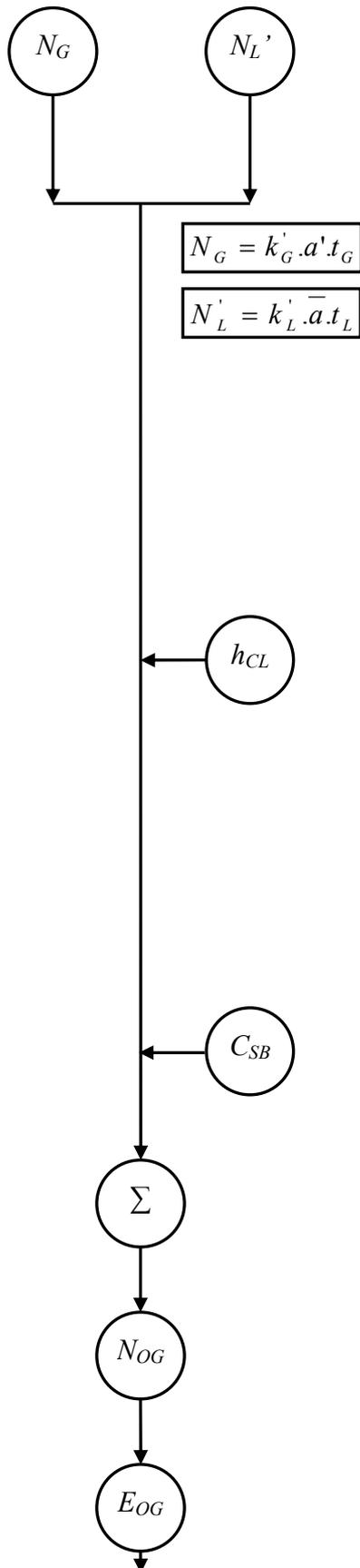


Tabela 4.1: Modelos para o cálculo do número de unidades de transferência de massa e eficiência de ponto

Pratos com <i>downcomer</i> (escoamento cruzado)	Pratos <i>dualflow</i> (escoamento contracorrente)
O'Connel (1946) MacFarland, Sigmund e VanWinkle (1972) AIChE (1958) Chan e Fair (1984) Zuiderweg (1982) Chen e Chuang (1994) Stichlmair (1978) Klemola e Ilme (1996)	Xu et al. (1994) Garcia e Fair (2002)
Bennett et al. (1997) Prado (1986) / Prado e Fair (1990) Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000)	

Tabela 4.2: Correlações para altura do líquido claro (h_{CL})

Pratos com <i>downcomer</i> (escoamento cruzado)	Pratos <i>dualflow</i> (escoamento contracorrente)
Gerster et al. (1963) Bennett et al. (1983) Hofhuis e Zuiderweg (1979) Hofhuis (1980) Stichlmair (1978) Dhulesia (1984) - valvulado	Xu et al. (1994) Garcia e Fair (2002)

Tabela 4.3: Correlações para fator de capacidade (C_{SB})

Pratos com <i>downcomer</i> (escoamento cruzado)	Pratos <i>dualflow</i> (escoamento contracorrente)
Fair (1961) Treybal (1968) Glitsch (1974)	Garcia e Fair (2002)

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{\lambda}{N_L'}$$

$$E_{OG} = 1 - \exp(-N_{OG})$$

$$\lambda = m \cdot \left[\frac{\left(\frac{M_G}{MW_G} \right)}{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right)} \right]$$

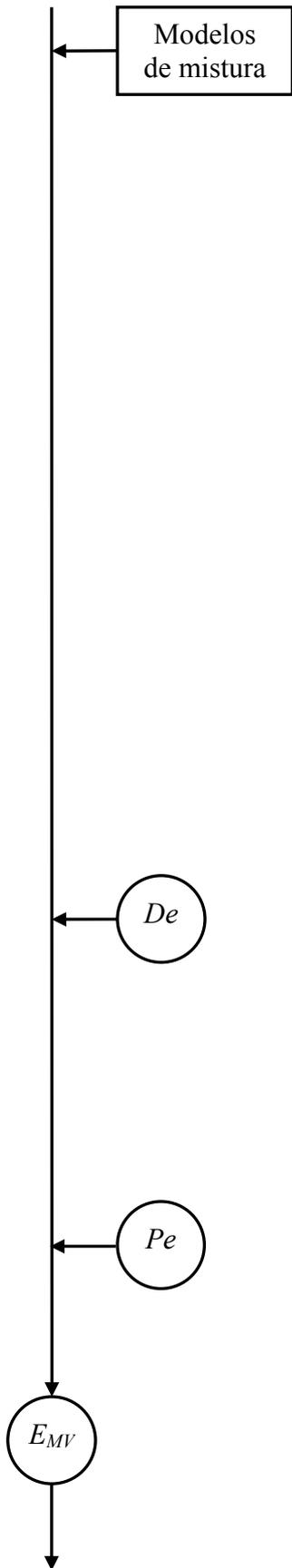


Tabela 4.4: Modelos de mistura do líquido sobre o prato

Pe	Tipo de mistura	Correlação
$Pe = 0$	completa (<i>dualflow</i>)	$E_{MV} = E_{OG}$
$0 < Pe < 20$	parcial	$\frac{E_{MV}}{E_{OG}} = \frac{1 - [e^{-(\eta+Pe)}]}{(\eta + Pe) \left[1 + \frac{(\eta + Pe)}{\eta} \right]}$ $+ \frac{e^\eta - 1}{\eta \left[1 + \frac{\eta}{(\eta + Pe)} \right]}$ $\eta = \frac{Pe}{2} \cdot \left[\sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot E_{OG}}{Pe}} - 1 \right]$
$Pe > 20$	empistonado (<i>plug flow</i>)	$E_{MV} = \frac{(e^{\lambda \cdot E_{OG}} - 1)}{\lambda}$

Tabela 4.5: Correlações para difusividade turbulenta (De)

Pratos com <i>downcomer</i> (escoamento cruzado)	Pratos <i>dualflow</i> (escoamento contracorrente)
Welch et al. (1964) Molnar (1974) – valvulado Chan e Fair (1984)	

$$Pe = \frac{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right) \cdot d_c}{L_w \cdot h_{CL} \cdot \left(\frac{\rho_L}{MW_L} \right) \cdot De}$$

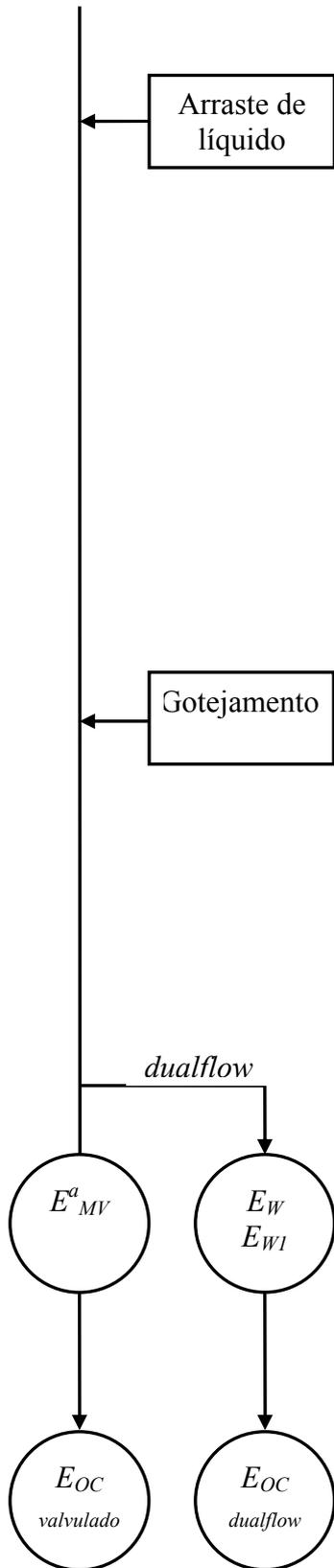


Tabela 4.6: Correlações para fração de líquido arrastada para o prato superior (L'/L)

Pratos com <i>downcomer</i> (escoamento cruzado)	Pratos <i>dualflow</i> (escoamento contracorrente)
Colburn (1936) Zuiderweg (1982) Koziol (1990, 1992)	Garcia e Fair (2002)
$E_{MV}^a = \frac{E_{MV}}{1 + \left(\frac{L'}{L}\right) \cdot E_{MV}}$	$E_W = \frac{E_{MV}}{1 + E_{MV} \cdot \Psi / (1 - \Psi)}$

Tabela 4.7: Correlações para gotejamento ou efeitos da baixa vazão

Pratos com <i>downcomer</i> (escoamento cruzado)	Pratos <i>dualflow</i> (escoamento contracorrente)
Lockett e Banik (1984)	Garcia e Fair (2002)
$Fr_h = u_H \cdot \left(\frac{\rho_G}{g \cdot h_{CL} \cdot (\rho_L - \rho_G)} \right)^{0,5}$	$E_{W1} = \frac{E_w}{1 + E_w \cdot \Psi' / (1 - \Psi')}$

Substituir E_{MV} por E_{MV}^a para pratos com *downcomer* e por E_{W1} para pratos *dualflow*.

$$E_{OC} = \ln \left[\frac{1 + E_{MV} \cdot (\lambda - 1)}{\ln \lambda} \right]$$

Dentre os modelos e as correlações mostrados no diagrama de blocos, agora serão indicados aqueles utilizados neste trabalho.

A Tabela 4.1 mostra diversos modelos para predição da eficiência de ponto (E_{OG}). Prado (1986) / Prado e Fair (1990) propuseram um novo modelo para predição da eficiência de ponto que, além de incluir a geometria dos pratos, vazões internas de líquido e vapor e propriedades físicas dos fluidos. Como todos os modelos antecessores, incluiu também a hidrodinâmica da dispersão acima do prato, como tamanho de bolhas e *jetting*, as velocidades de subida de ambos e a fração de bolhas e *jetting* nos furos. Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000) propuseram modificações nesse modelo, visando estendê-lo para sistemas orgânicos, já que foi originalmente desenvolvido para sistemas ar/água. Apesar do modelo de Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000) ter sido desenvolvido para pratos perfurados, neste trabalho utiliza-se este modelo estendendo sua aplicação para pratos valvulados com *downcomer* e pratos *dualflow*, propondo adaptações em alguns parâmetros. A diferença significativa deste modelo em relação aos seus antecessores é que passou a incluir a hidrodinâmica do prato e, comparado com o modelo de Chan e Fair (1984), teve um erro absoluto de 13,28 % contra 18,22 %, para pratos perfurados.

4.1.1 Pratos valvulados

Para comparação dos resultados do modelo de Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000), para pratos valvulados, escolheu-se outro modelo mostrado na Tabela 4.1, largamente utilizado em publicações, para efeitos de comparação com novos modelos e altamente recomendado por alguns autores, como Bennett et al. (1997), Garcia e Fair (2000) e Lockett (1986), que é o modelo de Chan e Fair (1984).

Na Tabela 4.2, para a escolha da correlação da altura do líquido claro (h_{CL}), no modelo de Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000) utilizou-se a correlação de Dhulesia (1984) recomendada por Lockett (1986), desenvolvida especificamente para pratos valvulados. Já no caso do modelo de Chan e Fair (1984), utilizou-se a correlação indicada pelos próprios autores, correlação de Bennett et al. (1983).

Na Tabela 4.3, para o fator de inundação, utilizou-se a correlação clássica de Fair (1961) apud Lockett (1986), dada na forma de equação por Treybal (1968) apud Lockett (1986).

Para transformar a eficiência de ponto (E_{OG}) em eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), utilizou-se o modelo de mistura do líquido sobre o prato de Lewis (1936) apud Lockett (1986) mostrado na Tabela 4.4 e para a difusividade turbulenta (De), mostrada na Tabela 4.5, a correlação de Molnar (1974) apud Lockett (1986), desenvolvida especificamente para pratos valvulados e recomendada por Lockett (1986).

O arraste de líquido (Tabela 4.6) foi estimado com as correlações de Zuiderweg (1982) e Colburn (1936) apud Lockett (1986). Já a vazão de gotejamento (Tabela 4.7), foi calculada segundo Lockett e Banik (1984) apud Lockett (1986). Neste caso, não há correlação simples para estimativa do impacto do gotejamento na eficiência, que é nulo ou baixo para pratos valvulados.

Finalmente, seguindo-se o diagrama de blocos, chega-se na estimativa da eficiência global da coluna, onde se utiliza a Equação 2.17.

4.1.2 Pratos *dualflow*

No caso dos pratos *dualflow*, há muito poucas publicações sobre métodos de cálculo de eficiência, como mostrado na Tabela 4.1. Xu et al. (1994) publicaram um modelo de eficiência bastante empírico, com ajuste de três constantes. Após isto, somente Garcia e Fair (2002) publicaram modificações a serem feitas no modelo base de Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000), estendendo sua aplicação para pratos *dualflow*. Utilizam-se neste trabalho, as modificações de Garcia e Fair (2002) no modelo base de Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000), comparando os resultados de eficiência com o modelo de Xu et al. (1994).

Encontraram-se duas correlações para estimar a altura do líquido claro (h_{CL}) (Tabela 4.2) em pratos *dualflow*. A correlação de Garcia e Fair (2002) é uma melhoria da correlação de Xu et al. (1994), ambas possuindo o mesmo formato.

Já para o fator de inundação (Tabela 4.3), arraste de líquido (Tabela 4.6) e gotejamento (Tabela 4.7), foram utilizadas as correlações de Garcia e Fair (2002), as únicas encontradas para esse tipo de prato.

Para a mistura de líquido sobre o prato, os pratos *dualflow* são do tipo mistura completa, ou seja, $E_{MV} = E_{OG}$, como mostrado na Tabela 4.4.

4.2 CÁLCULO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE *JETTING* NO PRATO

Prado (1986) / Prado e Fair (1990) produziram uma correlação para estimar a atividade dos furos, através do parâmetro FJ , a partir de parâmetros geométricos e de escoamento no prato perfurado, que são facilmente inseridos num programa de computador no desenvolvimento do modelo de transferência de massa, Equação 4.1. Tal correlação foi

utilizada nos modelos de predição da eficiência de ponto de Prado (1986) / Prado e Fair (1990) e Garcia (1999) / Garcia e Fair (2000).

$$FJ = \frac{u_A - u_{A,0}}{u_{A,100} - u_{A,0}} \quad 0 < FJ < 1 \quad (4.1)$$

onde

$$u_{A,0} = 0,1 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot h_W^{0,132} \cdot d_H^{-0,26} \cdot \phi^{0,992} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,27} \quad (4.2)$$

e

$$u_{A,100} = 1,1 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot h_W^{0,132} \cdot d_H^{-0,26} \cdot \phi^{0,992} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,27} \quad (4.3)$$

O desvio médio absoluto encontrado entre FJ calculado e observado foi de 27,48% para 243 pontos experimentais (PRADO, 1986).

O parâmetro FJ representa a fração de furos do prato que está em regime de *jet* e possui forte influência no valor final calculado para a eficiência de ponto média dos pratos da coluna.

Prado (1986), com base nas suas observações, concluiu que os modelos publicados para estimar a transição do regime de espuma para *spray* equivalem a ter regime de *jetting* nos orifícios de 45 a 71% do tempo. Como média grosseira, para uma proposta de modelagem, ao redor de 60% dos furos é previsto estarem em *jetting* quando o ponto de transição é alcançado (PRADO et al., 1987).

Johnson (1981) apud Prado et al. (1987) propôs a correlação mostrada na Equação 4.4

para estimar a velocidade superficial do gás baseada na área ativa no ponto de transição do regime espuma para *spray*, u_{AT} :

$$u_{AT} = 0,04302 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot \sigma^{0,06} \cdot \phi^{0,25} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,05} \cdot d_H^{-0,1} \quad (4.4)$$

O valor obtido a partir da Equação 4.4 ainda deve ser multiplicado por 0,92 e 1,12 para h_W de 25,4 mm e 101,6 mm, respectivamente. No caso de pratos *dualflow* foi utilizado $L_W = d_C$, ou seja, o comprimento da corda do vertedouro é igual ao diâmetro da coluna, pois em pratos *dualflow* não há *downcomer*, conseqüentemente, não há vertedouro, então o líquido cai para o prato inferior ao longo de todo diâmetro do prato *dualflow*.

A partir da afirmação de Johnson (1981) apud Prado et al. (1987) de que 60% dos furos estão em *jetting* quando u_{AT} é alcançada, propõe-se a seguinte correlação neste trabalho:

$$FJ_{modificado} = \frac{u_A \cdot 0,60}{u_{AT}} \quad (4.5)$$

Uma comparação entre esta correlação e a dada pela Equação 4.1 é feita na Seção 5.2 usando dados de colunas industriais.

4.3 ALGORITMO PARA CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE PRATO DE MURPHREE

Os modelos e correlações mostrados nos Capítulos 2 e 3 foram organizados de forma sistemática no simulador Aspen Plus 12.1 visando a simulação das colunas industriais. Para isto, desenvolveu-se um algoritmo iterativo de cálculo da eficiência de Murphree e eficiência global, reunindo todos os modelos e correlações escolhidos, em conjunto com a geometria dos

pratos, propriedades físicas e condições operacionais das colunas industriais. Este algoritmo foi inserido no simulador Aspen Plus 12.1, em programação em Fortran 77, dentro do bloco *flowsheeting options - calculator*, na mesma seqüência e estrutura mostrada no diagrama de blocos da Seção 4.1, permitindo o cálculo da eficiência global da coluna e as composições de topo e fundo para os diversos modelos e correlações.

A Figura 4.1 mostra, de forma simplificada, a utilização dentro do simulador, do algoritmo de cálculo da eficiência de prato de Murphree. O simulador calcula prato a prato a eficiência de Murphree e compara a tolerância da vazão molar por componente das correntes entre cada iteração até um valor pré-estabelecido, no caso 0,0001. Segundo a Aspen Technology Inc. (2000) a tolerância, para uma iteração k , é definida como:

$$-Tol \leq \frac{X_{k+1} - X_k}{X_{k+1}} \leq Tol \quad (4.6)$$

Após convergir, a simulação é finalizada e podem-se visualizar os resultados para as composições de topo e fundo da coluna, perfis de temperatura e de eficiência de Murphree e resultados parciais das variáveis dos modelos e correlações.

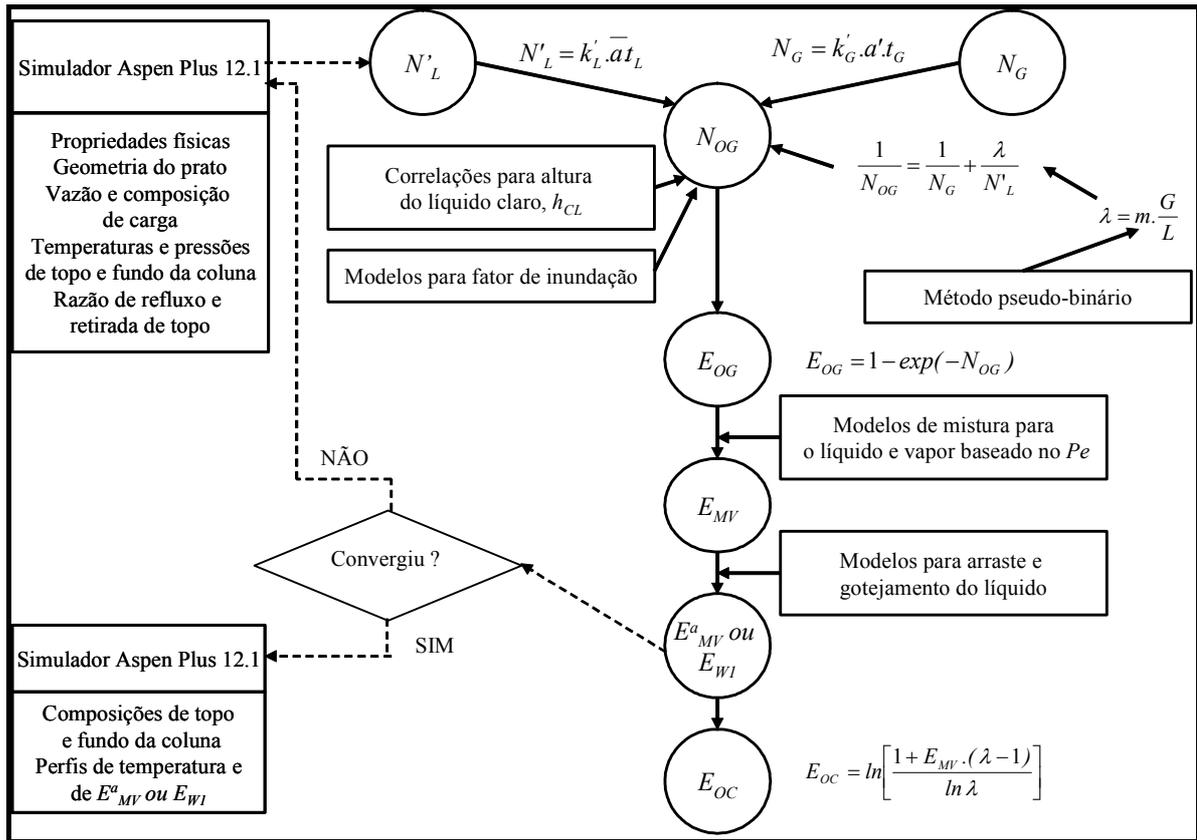


Figura 4.1: Algoritmo utilizado no simulador Aspen Plus 12.1 para cálculo da eficiência de prato aparente de Murphree (E_{MV}^a ou E_{W1})

5 VALIDAÇÃO DO MODELO

A implementação e o teste do modelo de Garcia (1999) modificado no parâmetro FJ são cobertos pelo presente Capítulo. É mostrada a validação do modelo proposto, que será chamado de Garcia (1999) modificado, comparando a eficiência global das colunas calculada por este modelo contra a eficiência global real das colunas industriais, sob diversas condições operacionais. Também se comparou o modelo de Garcia (1999) modificado com os modelos de Garcia (1999) original e Chan e Fair (1984) para pratos valvulados e com os modelos de Xu et al. (1994) e Garcia (1999) adaptado por Garcia e Fair (2002), para pratos *dualflow*.

5.1 COLUNAS AVALIADAS

As colunas utilizadas para a validação dos modelos de predição de eficiência foram modeladas no simulador Aspen Plus 12.1, visando a obtenção da eficiência global real dessas colunas e utilização dos modelos de predição da eficiência.

Para a simulação das colunas no Aspen Plus 12.1, primeiramente, montaram-se os fluxogramas, como mostrados na Seção 5.1.1. Na Seção 5.1.2 são mostrados os modelos termodinâmicos empregados e o porquê de sua escolha. Na Seção 5.1.3 é mostrado como o erro no balanço de massa foi reduzido. O método empregado para ajustar o balanço de massa está descrito na Seção 5.1.4. Os estados estacionários escolhidos são explicados na Seção 5.1.5.

5.1.1 Fluxogramas simplificados de processo das colunas avaliadas

As três colunas de destilação utilizadas neste estudo estão localizadas na Companhia Petroquímica do Sul – COPESUL, e são:

5.1.1.1 Fracionadora de C6

Faz parte da Unidade de Produção de Benzeno e sua função é separar, a partir de uma mistura de hidrocarbonetos C5-C9, um corte C6 no topo (rico em benzeno) e um corte C7+ no fundo. O contaminante do produto de topo é o tolueno, que deve ser controlado em no máximo 100 ppm massa. Nesta mistura, foram escolhidos como chave leve e pesado, o benzeno e o tolueno, respectivamente, pois a soma de ambos na corrente de carga representa de 70 a 75 % massa da composição total de carga desta coluna e também o principal objetivo desta coluna é minimizar a presença de tolueno no topo desta coluna. Na Figura 5.1 é mostrado um fluxograma simplificado dessa coluna de destilação.

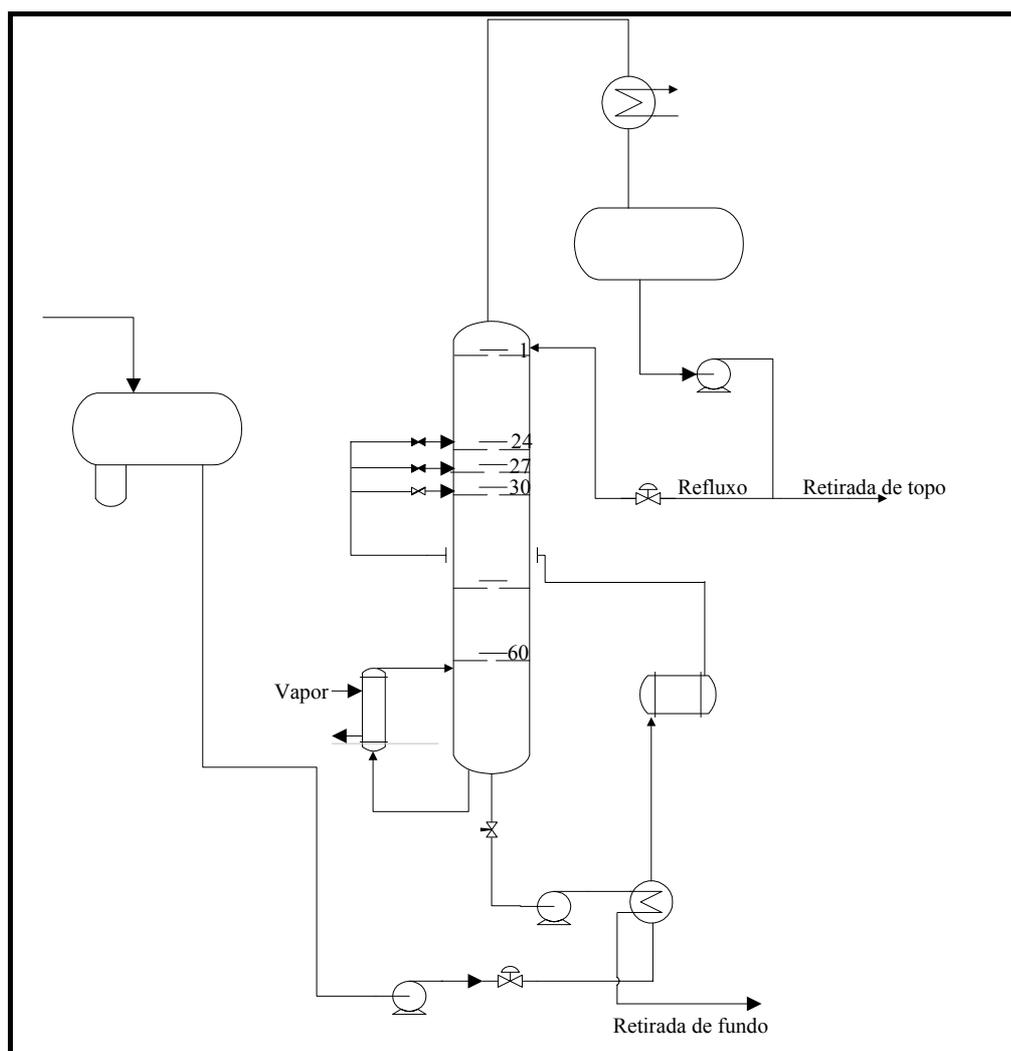


Figura 5.1: Fluxograma de processo da Fracionadora de C6

5.1.1.2 Fracionadora de buteno-1

Sua função é separar, a partir de uma mistura de hidrocarbonetos C4, buteno-1 no topo com a mínima quantidade de n-butano. Na Figura 5.2 é mostrado um fluxograma simplificado dessa coluna de destilação.

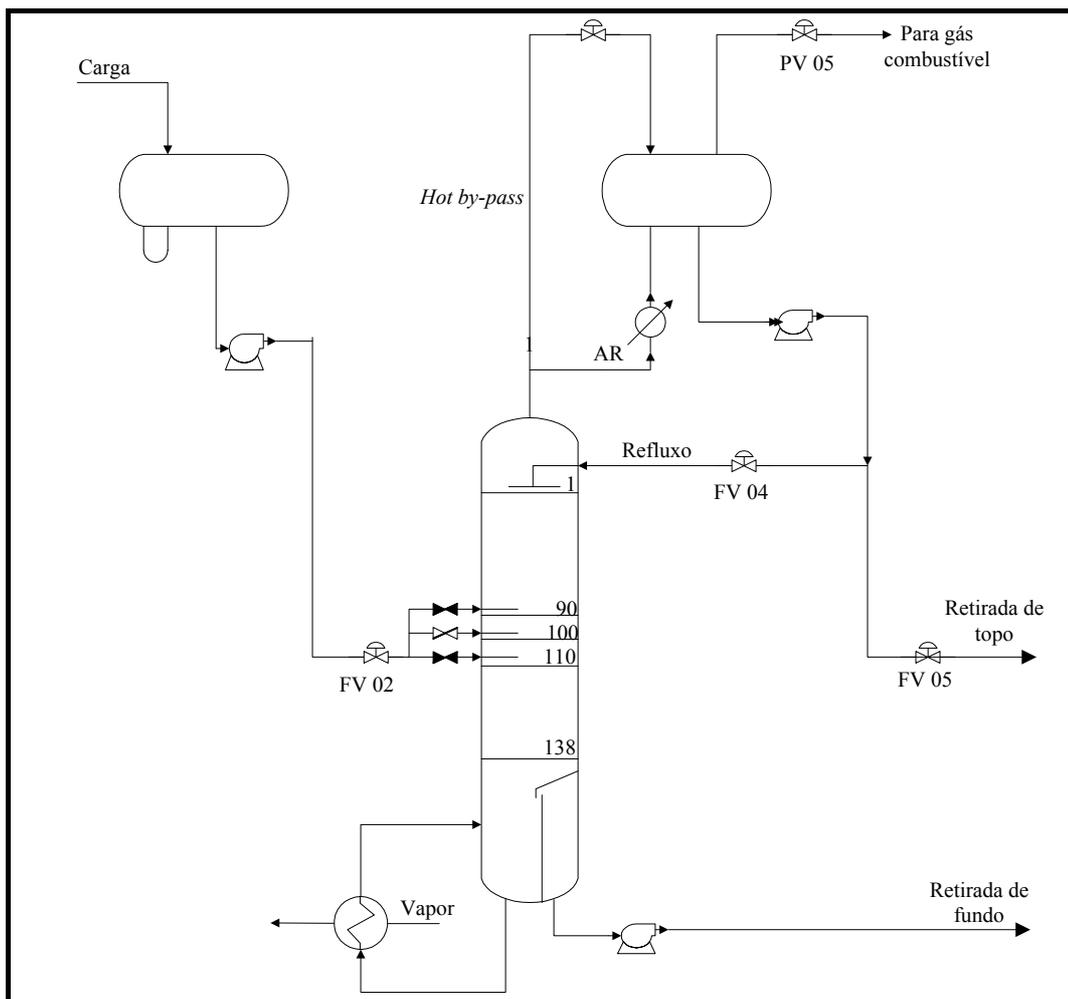


Figura 5.2: Fluxograma de processo da Fracionadora de buteno-1

5.1.1.3 Fracionadora de propeno

Sua função é separar propeno de alta pureza no topo (grau polímero, 99,50 %mol) do propano. Na Figura 5.3 é mostrado um fluxograma simplificado dessa coluna de destilação.

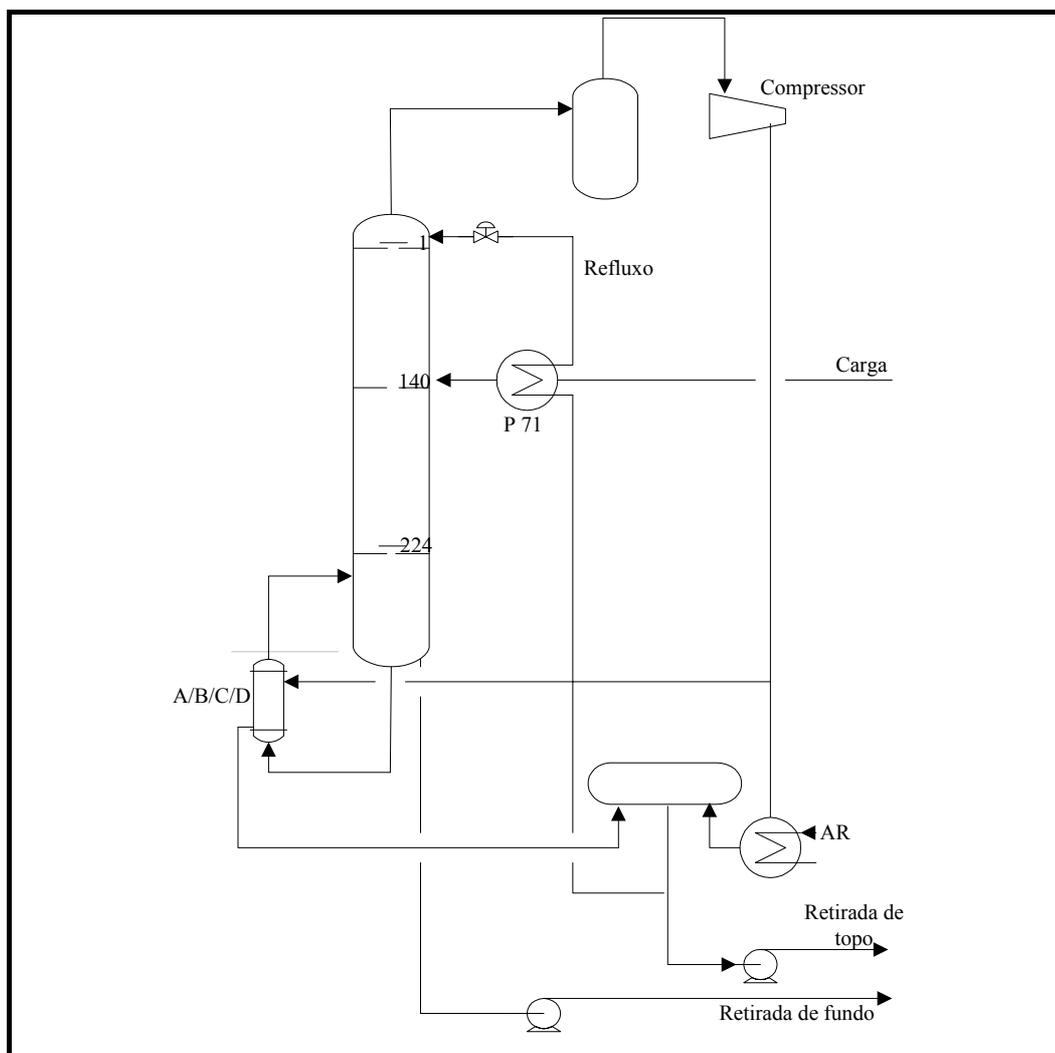


Figura 5.3: Fluxograma de processo da Fracionadora de propeno

O Apêndice B contém os dados completos dessas colunas industriais, indicando os vários casos estudados neste trabalho. As especificações das colunas são mostradas na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Especificações das colunas

	Fracionadora de C6	Fracionadora de buteno-1	Fracionadora de propeno
Diâmetro, d_C (m)	1,85	2,54	4,40
Altura (m)	34,5	64,7	99,7
Nº de pratos	60	138	224
Prato de carga	30	100	140
Tipo de prato	Valvulado tipo V-1 Sulzer	<i>dualflow</i>	<i>dualflow</i>
Diâmetro do furo, d_H (mm)	40	6	9
Espaçamento entre pratos, T_S (m)	0,5	0,4	0,4
Fração perfurada do prato, ϕ (%)	16,78	19,31	20,75
Área ativa, A_A (m ²)	2,254	5,067	15,205
Altura do vertedouro, h_W (mm)	52	6,35 (ondulação)	6,35 (ondulação)
Comprimento da corda, L_W (m)	1,264	2,54 (= d_C)	4,4 (= d_C)
Chave leve	benzeno	buteno-1	propeno
Chave pesado	tolueno	n-butano	propano

5.1.2 Modelos termodinâmicos

A Tabela 5.2 ajuda na seleção da equação de estado e modelo para coeficiente de atividade, conforme os sistemas que se está trabalhando.

As Fracionadoras de propeno e buteno-1 se enquadram no item “*light hydrocarbons separation train*” onde estão sugeridas as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson.

A Fracionadora de C6 se enquadra no item “*ethylbenzene and styrene plants*” onde estão sugeridas as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson e modelos de coeficiente de atividade, como NRTL e UNIFAC.

Tabela 5.2: Recomendações para escolha da equação de estado e modelos de coeficiente de atividade

Petrochemicals	
Application	Recommended Property Method
Ethylene plant Primary fractionator	Petroleum fugacity correlations (and assay data analysis)
Light hydrocarbons separation train	Equations of state for high pressure hydrocarbon applications
Quench tower	Equations of state for high pressure hydrocarbon applications
Aromatics BTX extraction	Liquid activity coefficients (very sensitive to parameters)
Substituted hydrocarbons VCM plant Acrylonitrile plant	Equations of state for high pressure hydrocarbon applications
Ether production MTBE, ETBE, TAME	Liquid activity coefficients
Ethylbenzene and styrene plants	Equations of state for high pressure hydrocarbon applications and Ideal (with Watsol) or liquid activity coefficient
Terephthalic acid	Liquid activity coefficients(with dimerization in acetic acid section)

Fonte: Aspen Technology Inc., 2000, p. 2-4.

5.1.2.1 Seleção do modelo para a Fracionadora de buteno-1

Segundo Lopes Filho (1986), o modelo de Soave-Redlich-Kwong é uma equação simples, com poucos parâmetros. Os resultados são razoáveis para equilíbrio líquido-vapor, sem constituintes polares. O parâmetro k_{ij} melhora a precisão, mas é dispensável para hidrocarbonetos. A predição de volume molar de líquido é sofrível e a presença de hidrogênio exige adaptação no modelo.

Para esse tipo de coluna, é recomendado o uso da equação de estado de Soave-Redlich-Kwong com coeficientes de interação binária e densidade do líquido ou volume molar da mistura líquida com o modelo de Lee-Kesler (LEE e KESLER, 1975), ao invés do modelo de Soave-Redlich-Kwong.

Jorge (1989a) concluiu, após análise do comportamento da fase vapor de binários de C4, que os modelos adequados são Soave-Redlich-Kwong e Virial, com método preditivo de

Hayden-O'Connell (HAYDEN e O'CONNELL, 1974).

O Manual Aspen (2000) recomenda que, para melhores resultados do método de Soave-Redlich-Kwong, os parâmetros de interação binária devem ser determinados a partir de dados experimentais ou de literatura de equilíbrio líquido-vapor.

O simulador Aspen versão 12 oferece duas opções para a equação de Soave-Redlich-Kwong, *SRK* ou *RK-SOAVE*. Segundo Sigal (2004), as regras de mistura da opção *SRK* foram adicionadas com um termo assimétrico baseado no trabalho de Mathias, Klotz e Prausnitz (MATHIAS et al., 1991); os parâmetros de interação binária foram revisados e possuem dependência com a temperatura; os cálculos dos coeficientes de fugacidade de um componente no líquido e vapor são obtidos por diferentes métodos. A opção *SRK* deve ser utilizada somente com banco de dados *Ethylene*.

Optou-se, no simulador Aspen, pela equação de estado de *SRK* com banco de dados para os parâmetros de interação binária *Ethylene* ao invés de *Pure 12*. Esse banco de dados é recomendado pela Aspen para plantas de petroquímicas, com compostos até 4 carbonos, conforme o Manual Aspen (2000).

Carmichael et al. (1962) fizeram experimentos com misturas de 6 tipos de compostos com 4 carbonos, isobutano, isobuteno, n-butano, buteno-1, trans-2-buteno, cis-2-buteno. Neste trabalho, estes compostos somam em torno de 99,5% da composição de carga da coluna Fracionadora de buteno-1, ou seja, podem-se comparar as volatilidades relativas obtidas por Carmichael et al. (1962) com as obtidas através do simulador, com diversas equações de estado. Na Figura 5.4, os experimentos que mais se aproximam das condições de pressões

(726 kPa man. a 788 kPa man.) e temperaturas (63 a 73 °C) do caso Q da Fracionadora de buteno-1 são os de número 6 e 9. Em ambos, o modelo *SRK – Ethylene* é o que mais se aproxima dos experimentos.

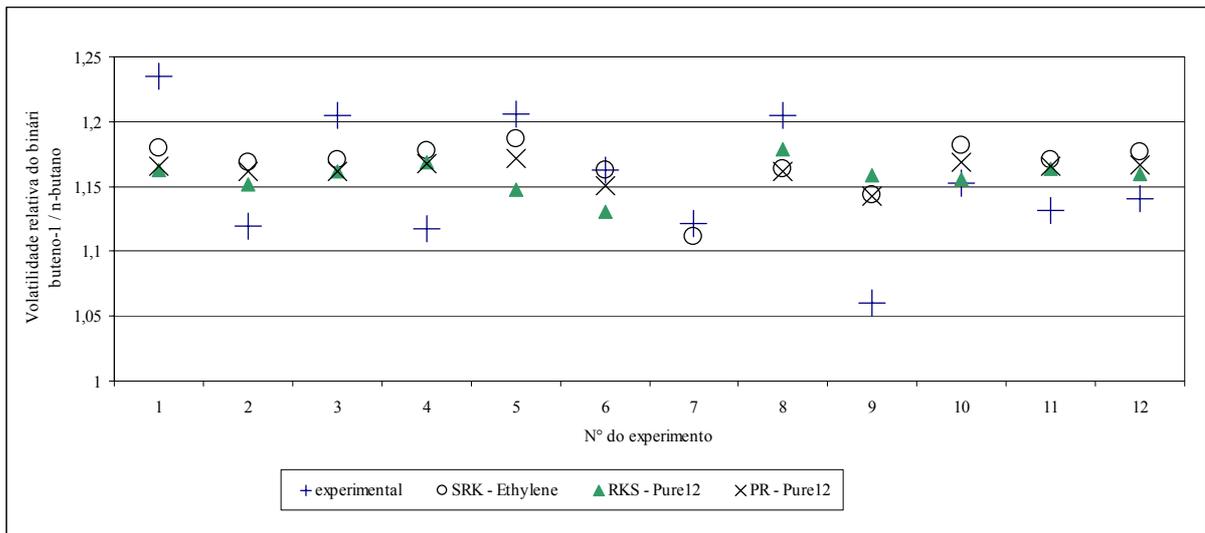


Figura 5.4: Volatilidades relativas obtidas por Carmichael et al. (1962)

Os parâmetros de interação binária para cada modelo foram:

a) *SRK – Ethylene*:

$$\text{H}_2 - \text{Propano}: k_{ij} = 0,101465$$

$$\text{H}_2 - \text{n-butano}: k_{ij} = 0,391100$$

$$\text{Propano} - \text{Isobutano}: k_{ij} = - 0,00290932$$

$$\text{Propano} - \text{n-butano}: k_{ij} = - 0,00207594$$

$$\text{Propano} - \text{C5's}: k_{ij} = 0,00305866$$

$$1,3\text{-butadieno} - \text{Buteno-1}: k_{ij} = 0,000780014$$

$$1,3\text{-butadieno} - \text{n-butano}: k_{ij} = 0,0128642$$

$$\text{Isobutano} - \text{n-butano}: k_{ij} = - 0,00377497$$

$$\text{Buteno-1} - \text{n-butano}: k_{ij} = 0,00222922$$

b) *RK-SOAVE - Pure 12*

H₂ – Propano: $k_{ij} = -0,2359$

H₂ - n-butano: $k_{ij} = -0,5100$

Propano - Isobutano: $k_{ij} = -0,01000$

Propano - C5's: $k_{ij} = 0,007800$

1,3-butadieno - Buteno-1: $k_{ij} = -0,004400$

1,3-butadieno - n-butano: $k_{ij} = 0,008100$

Isobutano - n-butano: $k_{ij} = 0,001100$

Buteno-1 - n-butano: $k_{ij} = -0,004800$

Metanol – Água: $k_{ij} = -0,07890$

GMEHLING et al. (1983, parte 6b, p. 699) apresentam o valor de $k_{ij} = -0,0056$ para *RK-SOAVE* para o binário buteno-1 / n-butano, que é muito próximo do valor já utilizado pelo banco de dados *Pure 12* do simulador Aspen.

c) *PENG-ROBINSON – Pure 12*

H₂ – Propano: $k_{ij} = -0,08330$

H₂ - n-butano: $k_{ij} = -0,3970$

Propano - Isobutano: $k_{ij} = -0,007800$

Propano - n-butano: $k_{ij} = 0,003300$

Propano - C5's: $k_{ij} = 0,01110$

1,3-butadieno - Buteno-1: $k_{ij} = 0,002200$

1,3-butadieno - n-butano: $k_{ij} = 0,01410$

Isobutano - n-butano: $k_{ij} = -0,0004000$

Buteno-1 - n-butano: $k_{ij} = 0,001100$

Metanol – Água: $k_{ij} = -0,07780$

Na Tabela 5.3 são comparados os perfis de temperaturas obtidos a partir das simulações contra os dados reais da coluna. Observou-se que para os pratos 1 e 40 foram obtidos resultados melhores com *RK-SOAVE*; para o prato 80, *PENG-ROBINSON* concordou melhor; enquanto para o prato 89 nenhum modelo concordou, o que sugere que o instrumento de campo pode estar com indicação falsa.

Outro ponto importante, mostrado na Tabela 5.3, é o valor da eficiência de Murphree (E_{MV}) necessária para ajustar as composições de topo e fundo da coluna. Utilizando-se *SRK – Ethylene*, a separação entre buteno-1 e n-butano se torna mais “difícil”, os pratos têm que ser bem mais eficientes (0,455) para conseguir-se a mesma especificação da corrente de topo da coluna do que se fosse utilizado *RK-SOAVE*. A eficiência global esperada para este tipo de prato, para fatores de operação (F_S) entre 1,0 e 2,0, está entre 0,50 e 0,70 (HUTCHINSON, 1956). Comparando os três primeiros modelos termodinâmicos da Tabela 5.3 fica evidente a influência dos parâmetros de interação binária no cálculo da eficiência.

Tabela 5.3: Perfis de temperaturas da Fracionadora de buteno-1

Temperaturas (°C)	Dados da coluna - Caso Q	<i>SRK – Ethylene</i>	<i>RK-SOAVE - Pure 12</i>	<i>RK-SOAVE - Dechema</i>	<i>PENG-ROBINSON – Pure 12</i>
Vaso de topo	57,68	57,00	57,00	57,00	57,00
Topo (prato 1)	62,80	62,54	62,80	62,82	63,15
Prato 40	65,08	64,24	64,99	65,05	64,92
Prato 80	67,52	67,00	68,06	68,13	67,77
Prato 89	69,55	67,99	68,79	68,94	68,62
Fundo (prato 140)	72,74	73,02	73,03	73,03	73,52
E_{MV} ajustada		0,455	0,358	0,350	0,448

Baseado nas informações até agora analisadas, visando resolver qual a equação de estado a ser utilizada, fez-se o resumo da Tabela 5.4, que mostra que a equação de estado

SRK-Ethylene é a que possui maior respaldo, sendo ela a escolha adotada neste trabalho.

Tabela 5.4: Comparação entre os modelos termodinâmicos para Fracionadora de buteno-1

	<i>SRK – Ethylene</i>	<i>RK-SOAVE</i>	<i>PENG-ROBINSON</i>
Carmichael et al. (1962)	X		
Perfis de temperaturas		X	
Recomendação do projetista	X		
Mais recente, regras de mistura e k_{ij} atualizados.	X		
Recomendação Aspen	X		
Experiência = eficiência de prato esperada	X		X

5.1.2.2 Fracionadora de propeno

Jorge (1989b) sugeriu Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson para essa coluna.

A escolha da equação de estado foi baseada nos perfis de temperaturas e na eficiência de Murphree esperada para este tipo de prato (*dualflow*), mostrados na Tabela 5.5. Em ambos os casos a equação de estado de Soave-Redlich-Kwong opção *RK-SOAVE - Pure 12*, foi a que melhor concordou com os dados de planta nos dois itens citados anteriormente, sendo ela a escolha adotada neste trabalho.

Tabela 5.5: Perfis de temperaturas da Fracionadora de propeno

Temperaturas (°C)	Dados da coluna - Caso D	<i>RK-SOAVE - Pure 12</i>	<i>SRK – Ethylene</i>	<i>PENG-ROBINSON - Pure 12</i>	<i>RK-SOAVE – Dechema</i>
Topo (prato 1)	29,01	27,71	27,51	28,08	27,71
Prato 140	30,23	30,34	30,79	30,75	30,93
Prato 185	32,51	33,02	34,62	33,47	34,67
Fundo (prato 224)	38,13	38,21	38,27	38,64	38,33
E_{MV} ajustada		0,4565	0,3450	0,4565	0,360

Os parâmetros de interação binária para cada modelo foram:

a) *RK-SOAVE - Pure 12*Etano – Eteno: $k_{ij} = 0,010$ Etano – Propano: $k_{ij} = -0,0022$ Etano – Propeno: $k_{ij} = 0,0026$ Propano – Propeno: $k_{ij} = 0,0080$

Jorge (1989b, p. 2) apresenta o valor de $k_{ij} = 0,0033$ para *RK-SOAVE* para o binário propeno / propano, oriundo da coletânea do DECHEMA.

b) *SRK – Ethylene*Etano – Eteno: $k_{ij} = 0,00321082$ Etano – Propano: $k_{ij} = 0,00169511$ Etano – Propeno: $k_{ij} = 0,0117991$ Propano – Propeno: $k_{ij} = 0,0030000$ c) *PENG-ROBINSON – Pure 12*Etano – Eteno: $k_{ij} = 0,00890000$ Etano – Propano: $k_{ij} = 0,00110000$ Etano – Propeno: $k_{ij} = 0,00890000$ Propano – Propeno: $k_{ij} = 0,00740000$

5.1.2.3 Fracionadora de C6

O modelo de coeficiente de atividade *NRTL* pode descrever o equilíbrio líquido-vapor e líquido-líquido de soluções fortemente não-ideais. O modelo requer parâmetros binários, geralmente obtidos da literatura e/ou de regressão linear de dados experimentais, já incluídos

no banco de dados do simulador Aspen Plus 12.1. O *NRTL* pode lidar com combinações de compostos polares e apolares com alta não-idealidade.

O modelo *UNIFAC* é um modelo de coeficiente de atividade como o *NRTL* e *UNIQUAC*, mas é baseado nas contribuições dos grupos funcionais ou nas contribuições moleculares. Na Tabela 5.6 são mostradas as variações deste modelo implementadas no simulador Aspen Plus 12.1.

Tabela 5.6: Variações dos modelos *UNIFAC*

UNIFAC Property Methods								
Property Method Name	Model Name	Parameters Rev. Yr	Tmin /K	Tmax /K	Henry Lit [†] Reg ^{††}		Vapor Phase EOS Name	Poynting Correction
UNIFAC	UNIFAC	5, 1991	290	420	X	X	Redlich-Kwong	X
UNIF-LL	UNIFAC	—, 1991	280	310	X	X	Redlich-Kwong	X
UNIF-HOC	UNIFAC	5, 1991	290	420	X	X	Hayden-O'Connell	X
UNIF-DMD	DMD-UNIF	1, 1993	290	420	X	X	Redlich-Kwong-Soave	X
UNIF-LBY	LBY-UNIF	—, 1987	290	420	X	X	Ideal Gas law	—

[†] An X indicates the parameters were obtained from the literature.

^{††} An X indicates the parameters were regressed by AspenTech from experimental data in the Dortmund Databank (DDB).

Fonte: Aspen Technology Inc., 2000, p. 2-47.

O *UNIFAC* com a modificação de *Dortmund* (*UNIF-DMD*), feita por Weidlich e Gmehling (1987) e Gmehling et al. (1993), é levemente melhor na parte combinatória. Segundo Lopes Filho (1986), o modelo *NRTL* de coeficiente de atividade do líquido é de fácil generalização para misturas multicomponentes, oferecendo boa previsão de imiscibilidades, bons resultados para misturas fortemente não-ideais. É aplicável tanto para o equilíbrio líquido-vapor como para equilíbrio líquido-líquido, apresentando resultados melhores que o modelo de Wilson.

A opção do Aspen *PCES* estima os parâmetros binários dos modelos *WILSON*, *NRTL* e *UNIQUAC*, usando os coeficientes de atividade à diluição infinita. Estes coeficientes podem ser obtidos a partir de dados laboratoriais e estimativas usando o método *UNIFAC*. Dos métodos *UNIFAC*, o que dá melhores resultados para os coeficientes de atividade à diluição infinita é com a modificação de *Dortmund*.

Foi utilizado o banco de dados do GMEHLING (1983, parte 6a, p. 368, 372, 375, 559, 591, 596, 604, parte 6b, p. 10, 46, 49, 158, 185, parte 7, p. 301) para obtenção dos parâmetros *A12*, *A21* e *ALPHA12* do modelo *NRTL*, para os binários apresentados na Tabela 5.7, onde a primeira linha de valores informa as páginas utilizadas do banco de dados. As demais linhas contêm os parâmetros *A12*, *A21* e *ALPHA12*, respectivamente. A comparação entre os diversos modelos é mostrada na Tabela 5.8.

Tabela 5.7: Parâmetros *A12*, *A21* e *ALPHA12* do modelo *NRTL*

NRTL	Páginas (página utilizada)					
	A12 A21 ALPHA 12					
	Benzeno (1)	Tolueno (1)	N-hexano (1)	N-heptano (1)	Metil-ciclopentano (1)	Metil-ciclohexano (1)
Benzeno (2)			559 (559) -106,6131 488,4492 0,2994		363 - 368 (368) -33,4320 285,0655 0,3004	
Tolueno (2)	279 - 301 (301) 111,1157 -121,2437 0,3033		591 - 595 (591) 18,8142 224,0904 0,3015	185 (185) -30,5760 268,3335 0,2986	375 (375) 996,0575 -531,9748 0,2974	30 - 46 (46) 96,8077 97,2195 0,3019
N-hexano (2)						
N-heptano (2)	158 (158) 597,6609 -213,0923 0,3017		598 - 606 (604) -285,9412 252,9977 0,3018		não tem	
Metil-ciclopentano (2)			369 - 374 (372) 347,4793 -258,3959 0,3056	não tem		não tem
Metil-ciclohexano (2)	10 - 12 (10) 954,7077 -514,0454 0,2994		596 (596) -492,5150 674,8940 0,3041	47 - 51 (49) -129,6606 145,8830 0,3074	não tem	

Tabela 5.8: Comparação entre os modelos para a Fracionadora de C6

Temperaturas (°C)	Dados da coluna - Caso J	<i>NRTL – VLE LIT</i> (1)	<i>NRTL - Dechema</i>	<i>NRTL – VLE LIT + Dechema</i>	<i>NRTL – VLE IG</i> (3)	<i>NRTL RK - VLE RK</i>	<i>UNIFAC - Dortmund</i>
Vaso topo	59,25	59,24	59,18	59,00	58,91	59,89	58,99
Topo	85,88	86,51	86,48	86,48	86,49	86,44	85,55
Prato 8	88,49	88,38	88,35	88,35	88,39	88,51	88,47
Prato 30	101,79	101,28	101,27	101,27	101,29	101,61	101,81
Prato 54	113,02	114,30	113,92	114,22	113,85	115,10	114,05
Fundo	139,04	135,61	135,63	135,67	135,69	135,82	135,86
E_{MV} ajustada		0,860	0,860	0,860	0,980	> 1,00	> 1,00
% N ₂ carga (2)		0,0125	0,0125	0,0125	0,0130	0,0170	0,0170
Vazão destilado (kg/h) (4)	14262	14249	14247	14261	14252	14254	14290

(1) *VLE LIT*: Parâmetros de interação binária a partir de dados de literatura inseridos no Aspen Plus 12.1.

(2) % mássico de N₂ na carga necessária para o ajuste da temperatura do vaso de topo.

(3) *VLE IG*: Fase vapor como gás ideal.

(4) Ajustou-se a vazão de destilado em cada caso buscando a especificação do teor de benzeno no fundo da coluna

A partir da análise da eficiência de Murphree esperada para o tipo de pratos (valvulados) nesta coluna, eliminaram-se os modelos *NRTL – VLE IG*, *NRTL – VLE RK* e *UNIFAC – Dortmund* por apresentarem E_{MV} próximas ou acima de 1,00.

Os outros três modelos apresentaram perfis de temperaturas e eficiência de Murphree similares. Mas, quanto maior a quantidade de parâmetros de interação binários melhor, ou seja, usando *Dechema + VLE LIT* a coluna estará mais bem representada.

Outro ponto, de menor importância, é que o modelo *NRTL* com *Dechema + VLE LIT* apresentou o menor erro de balanço de massa para o componente benzeno. Isto se deve ao ajuste que foi necessário fazer na retirada de topo visando especificar o teor de benzeno no fundo.

5.1.3 Estimativa das propriedades físicas

Os métodos para estimar as propriedades físicas dos sistemas das colunas utilizadas são apresentados nessa seção.

a) Volume molar da mistura de vapor

Fracionadora de propeno: *RK-SOAVE*

Fracionadora de buteno-1: *SRK*

Fracionadora de C6: *RK-SOAVE*

b) Volume molar da mistura de líquido

Fracionadora de propeno e de buteno-1: Lee-Kesler (LEE e KESLER, 1975)

Fracionadora de C6: Rackett / Campbell-Thodos (RACKETT, 1970)

c) Viscosidade do vapor (μ_G)

Fracionadora de propeno: Chapman-Enskog-Brokaw (REID et al., 1987, p. 392) com regra de mistura de Wilke (REID et al., 1977, p. 410-6) e pressão corrigida pelo modelo de Dean-Stiel.

Fracionadora de buteno-1: Lucas (REID et al., 1987, p. 421, 431).

Fracionadora de C6: Chapman-Enskog-Brokaw (REID et al., 1987, p. 392) com regra de mistura de Wilke (REID et al., 1977, p. 410-6).

d) Viscosidade do líquido (μ_L)

Fracionadora de propeno e de buteno-1: modelo API (*API Technical Data Book*, Petroleum Refining, 4 ed.).

Fracionadora de C6: Andrade (REID et al., 1987, p. 439).

e) Coeficiente de difusão molecular na fase vapor (D_G)

Fracionadora de propeno, de buteno-1 e de C6: modelo de Dawson-Khoury-Kobayashi (REID et al., 1987, p. 597) para difusividade de um componente na mistura, dado por:

$$D_G = \sum_{j \neq i} y_i \left[\sum_{j \neq i} \frac{D_{ij}^v}{y_j} \right] \quad (5.1)$$

onde o coeficiente de difusão binária D_{ij}^v é calculado pelo modelo de Dawson-Khoury-Kobayashi (REID et al., 1977, p. 560-5), y_i e y_j são as frações molares dos componentes na mistura de vapor.

f) Coeficiente de difusão molecular na fase líquida (D_L)

Fracionadora de propeno, de buteno-1 e de C6: modelo de Wilke-Chang (REID et al., 1987, p. 618) para difusividade de um componente na mistura.

Para a estimativa do coeficiente de difusão molecular nas fases vapor e líquida, no caso de misturas multicomponentes, Kister (1992) sugere o uso do método pseudobinário, ou seja, predizer os coeficientes de difusão binária dos chaves em cada fase da mistura na pressão e temperatura do sistema. Ferreira (2000) utilizou a difusividade do chave leve na mistura gasosa e a difusividade do chave pesado na mistura líquida. MacFarland, Sigmund e Van Winkle apud Vital et al. (1984) utilizaram a difusividade do chave leve na mistura.

Neste trabalho, utilizou-se a média das difusividades nos pratos do chave leve na mistura de hidrocarbonetos, nas fases líquida e vapor. O simulador Aspen Plus 12.1 não estima a difusividade de um binário em uma determinada mistura para cada prato da coluna

(BEAUDOIN, 2005). Separadamente, estimou-se a difusividade do pseudobinário chave leve no pseudobinário chave pesado para o topo e fundo das colunas, nas fases líquida e vapor, conforme recomendado por Kister (1992). As Tabelas 5.9, 5.10 e 5.11 mostram os valores obtidos para as difusividades utilizando-se os dois métodos citados anteriormente e seu impacto na predição da eficiência global. O desvio da eficiência global, comparando ambos os métodos, é baixo, por isto optou-se por utilizar o modelos já existente no simulador Aspen Plus 12.1, que estima a difusividade do chave leve na mistura, pela sua praticidade e que foram mostrados anteriormente nos itens “e” e “f”.

Tabela 5.9: Difusividades calculadas para o pseudobinário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a Fracionadora de propeno, caso D

	Topo (Prato 2)	Fundo (Prato 225)	Média	E_{OC} com Garcia (1999) modificado	E_{OC} com Xu et al. (1994)
Temperatura (°C)	27,73	38,21			
Pressão (kPa man.)	1143,94	1251,33			
Y_{LK}	99,5321	9,0622			
X_{LK}	99,5113	7,7556			
Y_{HK}	0,4679	90,9378			
X_{HK}	0,4887	92,2444			
D_L propeno/propano (m ² /s)	$1,21 \cdot 10^{-8}$	$1,34 \cdot 10^{-8}$	$1,27 \cdot 10^{-8}$	0,425	0,497
D_G propeno/propano (m ² /s)	$4,84 \cdot 10^{-7}$	$4,59 \cdot 10^{-7}$	$4,72 \cdot 10^{-7}$		
D_L propeno-mistura (m ² /s)			$1,30 \cdot 10^{-8}$	0,422	0,495
D_G propeno-mistura (m ² /s)			$4,64 \cdot 10^{-7}$		

Tabela 5.10: Difusividades calculadas para o pseudobinário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a Fracionadora de buteno-1, caso Q

	Topo (Prato 2)	Fundo (Prato 140)	Média	E_{OC} com Garcia (1999) modificado	E_{OC} com Xu et al. (1994)
Temperatura (°C)	62,54	73,02			
Pressão (kPa man.)	730,60	784,53			
Y_{LK}	99,5620	50,6458			
X_{LK}	99,5355	47,2461			
Y_{HK}	0,4380	49,3542			
X_{HK}	0,4645	52,7539			
D_L buteno-1/n-butano (m ² /s)	$11,1 \cdot 10^{-9}$	$11,8 \cdot 10^{-9}$	$11,5 \cdot 10^{-9}$	0,473	0,517
D_G buteno-1/n-butano (m ² /s)	$6,45 \cdot 10^{-7}$	$6,34 \cdot 10^{-7}$	$6,40 \cdot 10^{-7}$		
D_L buteno-1/mistura (m ² /s)			$9,79 \cdot 10^{-9}$	0,474	0,516
D_G buteno-1/mistura (m ² /s)			$6,46 \cdot 10^{-7}$		

Tabela 5.11: Difusividades calculadas para o pseudobinário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a Fracionadora de C6, caso J

	Topo (Prato 2)	Fundo (Prato 62)	Média	E_{OC} com Garcia (1999) modificado	E_{OC} com Chan e Fair (1984)
Temperatura (°C)	86,48	135,67			
Pressão (kPa man.)	28,83	61,59			
Y_{LK}	99,9990	4,2813			
X_{LK}	99,9975	2,0644			
Y_{HK}	0,0010	95,7187			
X_{HK}	0,0025	97,9356			
D_L benzeno-tolueno (m ² /s)	$4,97 \cdot 10^{-9}$	$8,01 \cdot 10^{-9}$	$6,49 \cdot 10^{-9}$	0,805	1,086
D_G benzeno-tolueno (m ² /s)	$3,41 \cdot 10^{-6}$	$3,46 \cdot 10^{-6}$	$3,44 \cdot 10^{-6}$		
D_L benzeno-mistura (m ² /s)			$6,55 \cdot 10^{-9}$	0,808	1,071
D_G benzeno-mistura (m ² /s)			$3,20 \cdot 10^{-6}$		

Outra análise realizada foi a da influência da difusividade no resultado final da eficiência global da coluna para os modelos utilizados, mostrada na Tabela 5.12. A primeira linha de cada caso refere-se às difusividades que estão sendo utilizadas nos modelos, ou seja, coeficiente de difusão molecular do chave leve na mistura de hidrocarbonetos.

Tabela 5.12: Sensitividade da difusividade na predição da eficiência global das colunas

Difusividade no líquido (D_L) (m^2/s)	Difusividade no vapor (D_G) (m^2/s)	E_{OC} com Garcia (1999) modificado	E_{OC} com Xu et al. (1994)
Fracionadora de propeno, caso D			
$1,30 \cdot 10^{-8}$	$4,64 \cdot 10^{-7}$	0,422	0,495
$50,00 \cdot 10^{-8}$	$4,64 \cdot 10^{-7}$	0,422	0,504
$5,00 \cdot 10^{-8}$	$4,64 \cdot 10^{-7}$	0,422	0,501
$1,30 \cdot 10^{-8}$	$4,00 \cdot 10^{-7}$	0,395	0,482
$1,30 \cdot 10^{-8}$	$5,00 \cdot 10^{-7}$	0,435	0,503
Fracionadora de buteno-1, caso Q			
$9,79 \cdot 10^{-9}$	$6,46 \cdot 10^{-7}$	0,474	0,516
$5,00 \cdot 10^{-9}$	$6,46 \cdot 10^{-7}$	0,474	0,513
$50,00 \cdot 10^{-9}$	$6,46 \cdot 10^{-7}$	0,474	0,522
$9,79 \cdot 10^{-9}$	$6,00 \cdot 10^{-7}$	0,462	0,511
$9,79 \cdot 10^{-9}$	$7,00 \cdot 10^{-7}$	0,488	0,523
Difusividade no líquido (D_L) (m^2/s)	Difusividade no vapor (D_G) (m^2/s)	E_{OC} com Garcia (1999) modificado	E_{OC} com Chan e Fair (1984)
Fracionadora de C6, caso J			
$6,55 \cdot 10^{-9}$	$3,20 \cdot 10^{-6}$	0,808	1,071
$1,00 \cdot 10^{-9}$	$3,20 \cdot 10^{-6}$	0,808	0,922
$10,00 \cdot 10^{-9}$	$3,20 \cdot 10^{-6}$	0,808	1,084
$6,55 \cdot 10^{-9}$	$3,00 \cdot 10^{-6}$	0,797	1,055
$6,55 \cdot 10^{-9}$	$4,00 \cdot 10^{-6}$	0,815	1,135

Nota-se que a variação da difusividade do líquido (D_L) não possui influência na eficiência global da coluna (E_{OC}) para o modelo de Garcia (1999) modificado. A influência da variação da difusividade do vapor (D_G) tem um impacto bem maior do que D_L sobre a eficiência global das colunas, nos dois modelos de predição de eficiência. Mas, mesmo neste caso, o impacto de D_G sobre E_{OC} é baixo. No pior dos casos, o da Fracionadora de propeno, uma variação de 25 % na D_G gerou uma variação de 10 % em E_{OC} no modelo de Garcia (1999) modificado. Para os demais casos esta variação ficou abaixo de 5% para E_{OC} .

g) Tensão superficial (σ)

Fracionadora de propeno e de buteno-1: API (*API Technical Data Book*, Petroleum Refining, 4 ed.).

Fracionadora de C6: Hakim-Steinberg-Stiel (REID et al., 1987, p. 638).

h) Solubilidade da água

Para a solubilidade da água na fase orgânica, o método escolhido afeta os valores do coeficiente de solubilidade da água na fase líquida e gasosa.

Opção do Aspen – 0: Correlação de solubilidade da água com fugacidade da fase vapor da água. Calculado pelo método da propriedade de fase de água livre.

Opção do Aspen – 1: Correlação de solubilidade da água com fugacidade da fase vapor da água. Calculado pelo método da propriedade primária.

Opção do Aspen – 2: Método 1, mas inclui correção para os coeficientes de atividade. Recomendado para sistemas insaturados.

Opção do Aspen – 3: Propriedade do método primário. Os parâmetros binários apropriados para água são requeridos.

Opção do Aspen – 4: Método 2, mas a solubilidade da água é limitada em 1. Indicado para sistemas onde a fase líquida é predominantemente água.

Métodos escolhidos: Fracionadora de propeno = 3, Fracionadora de buteno-1 = 0, Fracionadora de C6 = 3.

Para a Fracionadora de propeno não há presença de água na corrente de carga, ou seja, o método não tem influência nos resultados da simulação. Para a Fracionadora de C6 utilizou-se o método 3, sugerido pelo simulador Aspen Plus 12.1. No caso da Fracionadora de buteno-1, as análises de planta da corrente de topo indicam a presença de água, enquanto na simulação conseguiu-se tal efeito somente com o método 0.

5.1.4 Ajuste dos balanços de massa

Inicialmente, verificou-se a calibração dos principais instrumentos de medição de vazões, temperaturas e pressões. O erro no balanço de massa por componente estava $< 5\%$, conforme recomendado por Kister et al. (1998).

O erro no balanço de massa foi reduzido utilizando-se reconciliação de dados das vazões de processo por projeção matricial (CROWE et al., 1983) em conjunto com o uso do simulador Aspen Plus 12.1. Priorizou-se a minimização do erro dos componentes chave leve e pesado.

% erro = erro relativo no balanço de massa do componente

= vazão mássica do componente ((carga – topo - fundo) / carga) x 100

erro = erro absoluto no balanço de massa do componente

= vazão mássica da (carga – topo – fundo), em kg/h

5.1.4.1 Fracionadora de propeno

A Tabela 5.13 mostra o erro do balanço de massa para os chaves leve e pesado, onde os tipos de erros foram explicados no início desta seção.

Tabela 5.13: Erro no balanço de massa por componente da Fracionadora de propeno

Data Horário	Caso C 27/05/2004 16:00 hs às 23:00 hs		Caso D 17/06/2004 20:00 hs às 21:00 hs	
	% erro	erro	% erro	erro
Propano	0,01	0,15	0,04	0,61
Propeno	-0,02	-4,36	0,00	-0,30

Neste caso, foi necessário aumentar a retirada de destilado para ajustar o balanço de massa, baseado na reconciliação de dados.

5.1.4.2 Fracionadora de buteno-1

A Tabela 5.14 mostra o erro do balanço de massa para os chaves leve e pesado, onde os tipos de erros foram explicados no início dessa seção.

Tabela 5.14: Erro no balanço de massa por componente da Fracionadora de buteno-1

Data / Horário	Caso H 05/03/2002 às 20:00 hs a 08/03/2002 às 6 hs		Caso P 23/09/2003 às 00:00 hs a 25/09/2003 às 7:00 hs		Caso Q 17/06/2004 9:00 hs a 11:00 hs		Caso R 25/06/2004 7:00 hs a 8:36 hs	
	% erro	erro	% erro	erro	% erro	erro	% erro	erro
Buteno-1 + 2-trans- buteno	0,70	31,27	-2,54	-242,5	-2,96	-199,6	1,65	129,5
n-butano	-10,02	-116,32	5,15	98,57	0,40	21,12	-10,28	-155,0

O balanço de massa foi ajustado usando os seguintes critérios:

- A composição de carga foi ajustada, nos compostos buteno-1 e trans-2-buteno até fechar a composição de topo destes compostos. Na cromatografia gasosa, estes compostos possuem tempo de retenção similares, saindo sobrepostos no cromatograma, ou seja, pode haver um erro em seus teores na corrente de carga. Na corrente de topo aparecem traços de trans-2-buteno, assim o teor de buteno-1 no topo é mais confiável que na carga.

- Não pode ser feita a comparação da composição do gás combustível da simulação com os resultados de análise de planta, pois há grande diferença nos compostos isobutano e buteno-1 devido à inexistência dos parâmetros de interação binária (k_{ij}) para este binário.

- Ajustou-se a E_{MV} no simulador Aspen Plus 12.1 até a vazão total de n-butano da corrente de topo + gás combustível estar próxima dos valores analisados em planta.

- O elevado erro relativo para o composto n-butano provavelmente deve-se a um erro

na análise de laboratório da retirada de fundo.

5.1.4.3 Fracionadora de C6

A Tabela 5.15 mostra o erro do balanço de massa para os chaves leve e pesado, onde os tipos de erros foram explicados no início dessa seção.

Tabela 5.15: Erro no balanço de massa por componente da Fracionadora de C6

Data / Horário	Caso B		Caso J		Caso K		Caso L		Caso M	
	04/02/2001 às 00:00 hs a 09/02/2001 às 00:00 hs		09/07/2004 10:12 hs a 12:36 hs		18/02/2004 às 06:00 hs a 19/02/2004 às 16:00 hs		27/01/2004 às 00:00 hs a 30/01/2004 às 00:00 hs		12/10/2003 às 11:00 hs a 15/10/2003 às 00:00 hs	
	% erro	erro	% erro	erro	% erro	erro	% erro	erro	% erro	erro
Benzeno	0,03	3,77	0,50	60,6	0,11	14,1	0,24	25,8	-0,18	-22,8
Tolueno	-0,07	-4,01	0,77	43,2	0,57	33,8	1,52	74,0	-1,14	-68,3

O balanço de massa foi ajustado usando os seguintes critérios:

- Aumentando-se a E_{MV} no simulador Aspen Plus 12.1 somente o teor de tolueno na corrente de topo era reduzido.
- Aumentando-se a retirada de destilado somente o teor de benzeno na corrente de fundo era reduzido.
- Reduziu-se a temperatura do vaso de topo da simulação, colocando N_2 na carga até ajustar com a temperatura da coluna real.
- Reduziu-se o teor dos compostos não-chaves pesados e aumentou-se o teor dos compostos não-chaves leves até reduzir o teor de benzeno na corrente de topo e ajustar o teor de C6 não aromáticos (metil-ciclopentano e n-hexano) na corrente de topo, conforme os dados de planta.

5.1.5 Escolha dos estados estacionários

Os estados estacionários escolhidos foram baseados em períodos onde as vazões de carga, refluxo e retiradas estavam com baixa variabilidade. As escolhas foram confirmados utilizando-se testes univariáveis de inclinação, aleatoriedade e normalidade, conforme o método de Narasimhan et al. (1986) com o auxílio do programa desenvolvido por Birnfeld (2004). Foram tabelados também o desvio padrão e a variância. Esses dados tabelados são mostrados no Apêndice C.

5.2 COMPARAÇÃO DAS CORRELAÇÕES DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE JETTING

O parâmetro FJ representa a fração de furos do prato que está em regime de *jetting* e possui forte influência no valor final calculado para a eficiência de ponto média dos pratos da coluna, como se pode ver na Figura 5.5, especialmente no caso de pratos *dualflow*.

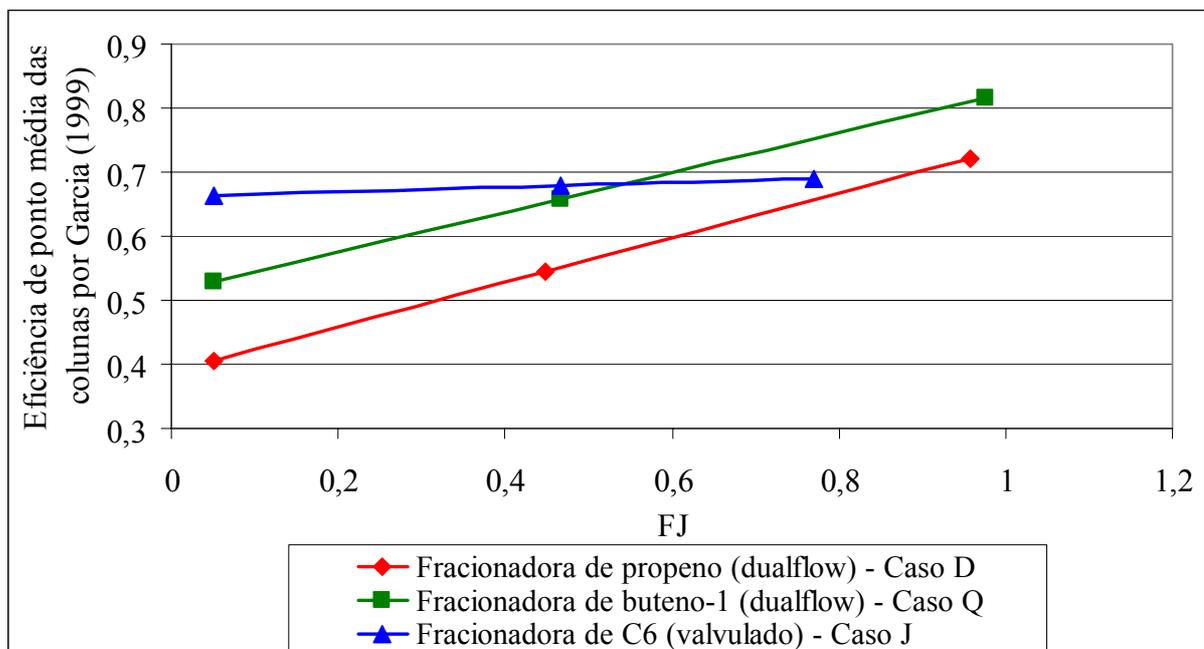


Figura 5.5: Influência de FJ na eficiência de ponto (E_{OG}) calculada pelo modelo de Garcia (1999) para as colunas utilizadas neste trabalho

5.2.1 Pratos *dualflow*

Os valores de FJ calculados através da correlação de Prado (1986) para os pratos *dualflow* (Fracionadora de propeno e Fracionadora de buteno-1) foram bem menores do que o esperado para esse tipo de prato. Prado (1986) mostrou na Figura 5.6 que à medida que h_w diminui, a fração de furos em *jetting* (FJ) aumenta. No caso de pratos *dualflow*, mais especificamente no caso de pratos *dualflow* ondulados, onde as alturas das ondulações do prato (h_w) não passam de 6,35 mm, seria esperada uma fração de *jetting* altíssima, acima do encontrado pela Equação 4.1 de Prado (1986).

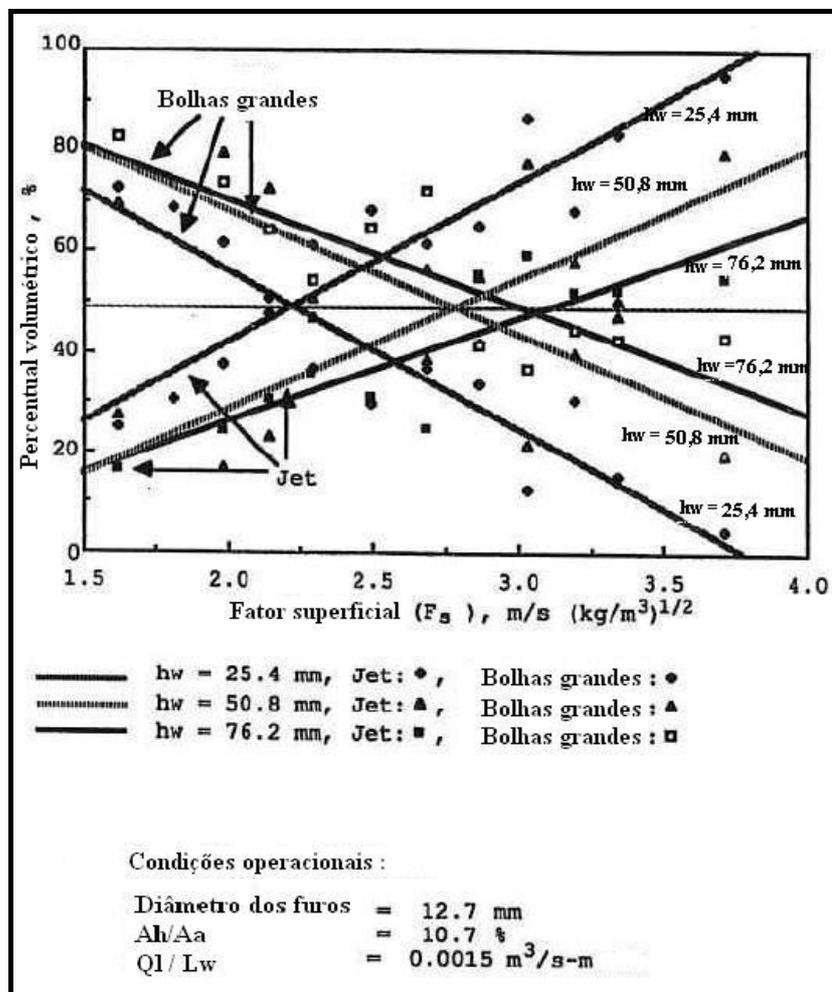


Figura 5.6: Percentual volumétrico de *jetting* e bolhas grandes em função do fator F_s variando a altura do vertedouro, h_w (PRADO, 1986)

As Figuras 5.7 e 5.8 comparam os valores de FJ encontrados através de Prado (1986), Equação 4.1, e a modificação feita por este trabalho, Equação 4.5, para as Fracionadoras de

propeno e buteno-1, respectivamente.

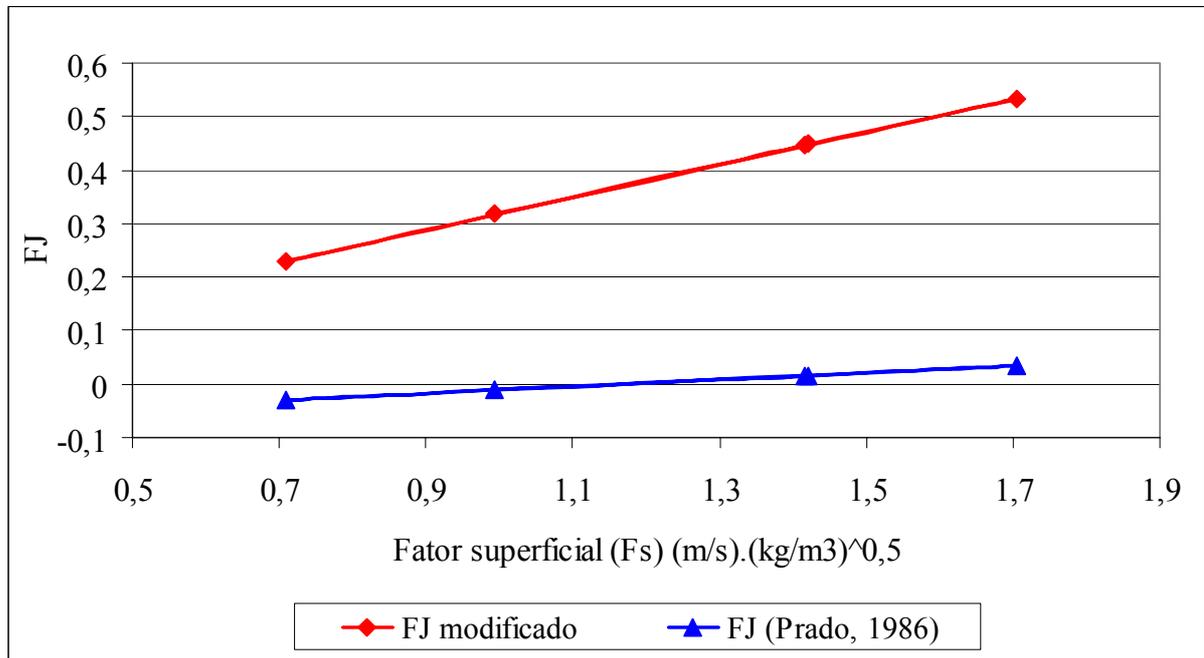


Figura 5.7: Comparação entre *FJ* modificado (proposto neste trabalho) e *FJ* calculado por Prado (1986), para a coluna Fracionadora de propeno (pratos *dualflow*)

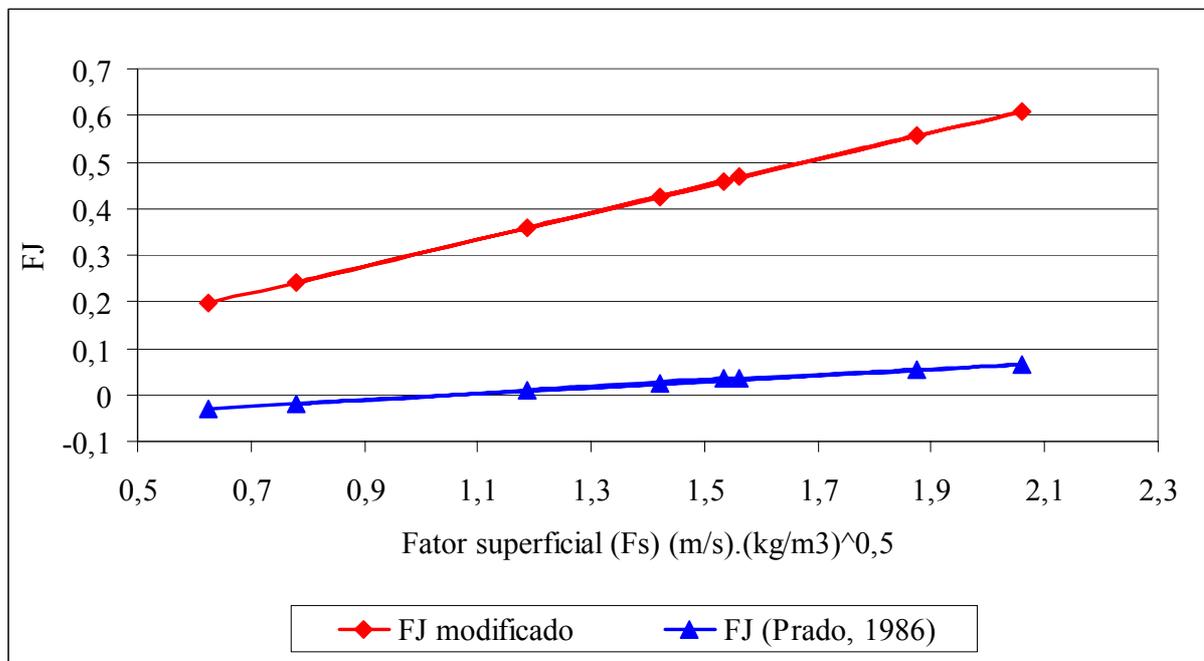


Figura 5.8: Comparação entre *FJ* modificado (proposto neste trabalho) e *FJ* calculado por Prado (1986), para a coluna Fracionadora de buteno-1 (pratos *dualflow*)

A correlação proposta por Prado (1986) foi desenvolvida para pratos perfurados com *downcomer*. Sua extensão para pratos *dualflow*, sem *downcomer*, não é aplicável, pois mesmo a altas vazões de vapor, ou seja, altos valores de F_S , os valores de FJ não passaram de 0,10.

5.2.2 Pratos valvulados

No caso dos pratos valvulados (Fracionadora de C6), a correlação de Prado (1986) (Equação 4.1) apresentou baixos resultados para FJ , enquanto que a modificação deste trabalho (Equação 4.5) apresentou valores elevados para FJ , como mostrado na Figura 5.9.

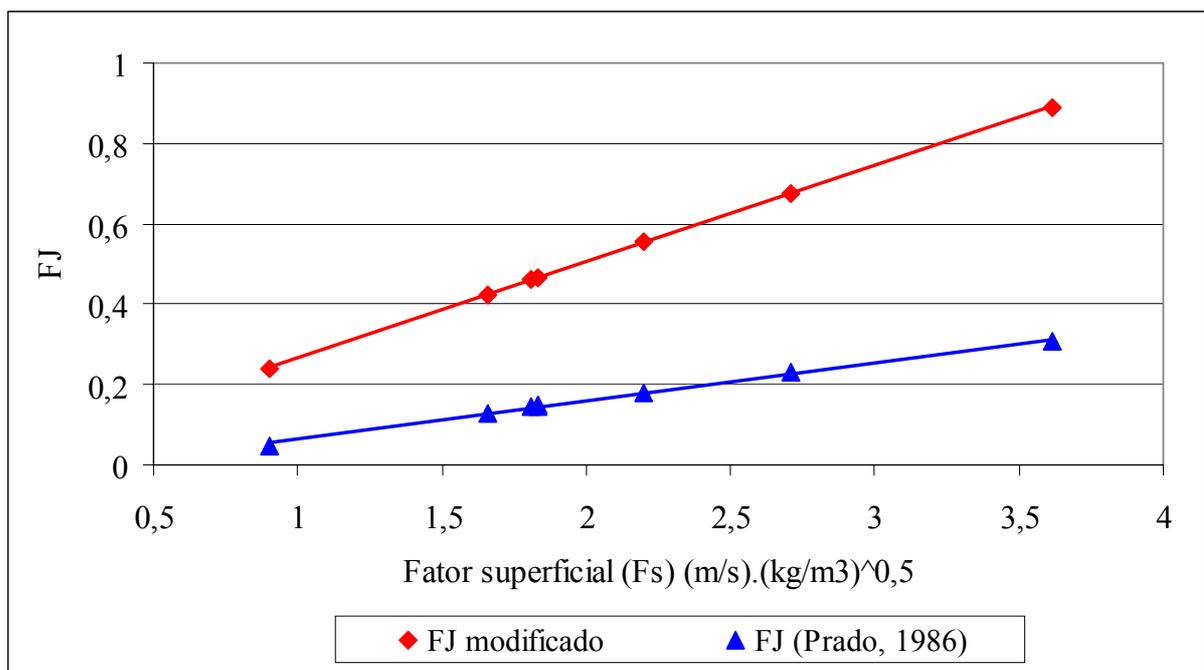


Figura 5.9: Comparação entre FJ modificado (proposto neste trabalho) e FJ calculado por Prado (1986), para a coluna Fracionadora de C6 (pratos valvulados)

A Equação 4.1 de Prado (1986) apresentou resultados para FJ variando de 0,05 a 0,30 e a Equação 4.5 (proposta neste trabalho) apresentou resultados para FJ variando de 0,25 a 0,85, para F_S variando de 1,0 a 3,5. Analisando os experimentos realizados por Prado (1986) mostrados nas Figuras 5.6, 5.10, 5.11 e 5.12 e comparando as condições operacionais /

geométricas utilizadas por Prado (1986) com os da Fracionadora de C6, onde tem-se: $Q_L/L_W = 0,0055 \text{ m}^3/(\text{m.s})$, $d_H = 40 \text{ mm}$ (valvulado), $\phi = 16,78\%$ e $h_W = 0,052 \text{ m}$, é de se esperar valores mais altos do que os previstos pela Equação 4.1 e valores mais baixos do que os previstos pela Equação 4.5 para FJ , devido à forte influência de Q_L/L_W , h_W e ϕ altos como redutores do *jetting*, neste último caso. Apesar disto, o modelo de Garcia (1999) com $FJ_{\text{modificado}}$, apresentou predições da eficiência global, E_{OC} , bem mais próximos das colunas reais, conforme é mostrado na Tabela 5.19. Os efeitos dos parâmetros d_H , Q_L/L_W , h_W e ϕ estão contidos nos modelos de FJ através das correlações das velocidades superficiais $u_{A,0}$, $u_{A,100}$ e u_{AT} , mostrados nas Equações 4.2, 4.3 e 4.4, respectivamente.

Outro ponto observado, é que a correlação para FJ de Prado (1986), mesmo em altas vazões de vapor, ou seja, F_S próximo de 4,0, a FJ ficou longe dos 100 %, ao contrário do previsto nos experimentos mostrados nas Figuras 5.6, 5.10, 5.11 e 5.12, levando em conta as diferenças entre as condições operacionais e geométricas dos pratos. Já o modelo de $FJ_{\text{modificado}}$ representou melhor esse efeito, como mostrado na Figura 5.9.

Na Figura 5.10, Prado (1986) mostrou que quanto maior d_H , maior o parâmetro FJ , para regime de *jetting*.

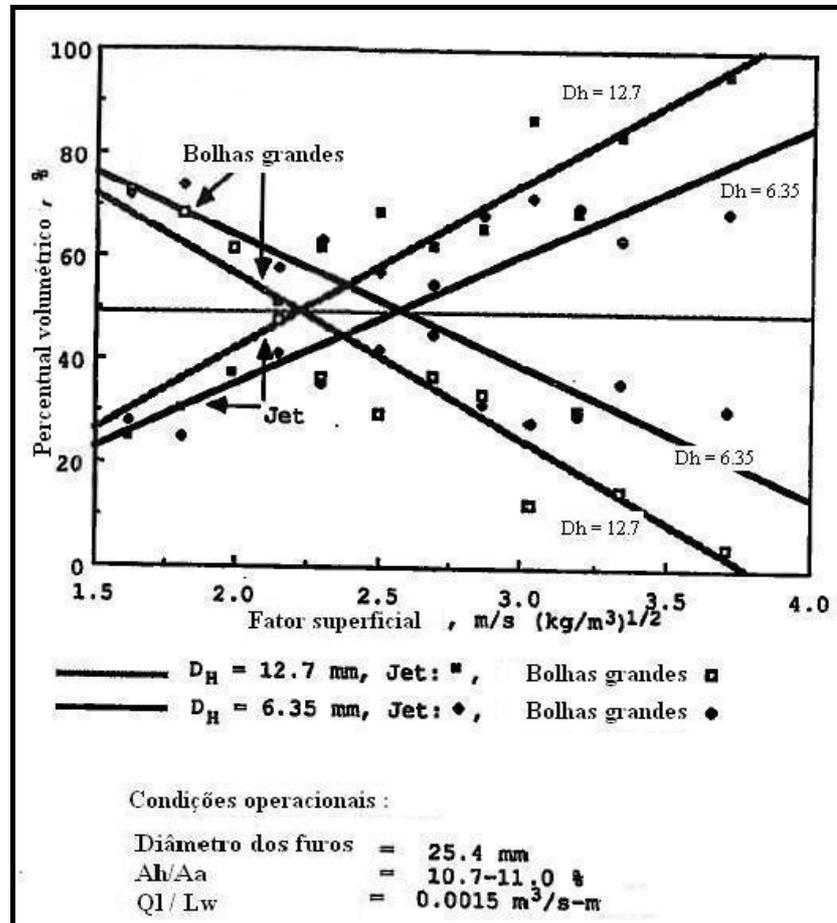


Figura 5.10: Percentual volumétrico de *jetting* e bolhas grandes em função do fator F_S variando o diâmetro do furo, d_H (PRADO, 1986)

Na Figura 5.11, Prado (1986) mostrou que quanto maior ϕ , menor o parâmetro FJ .

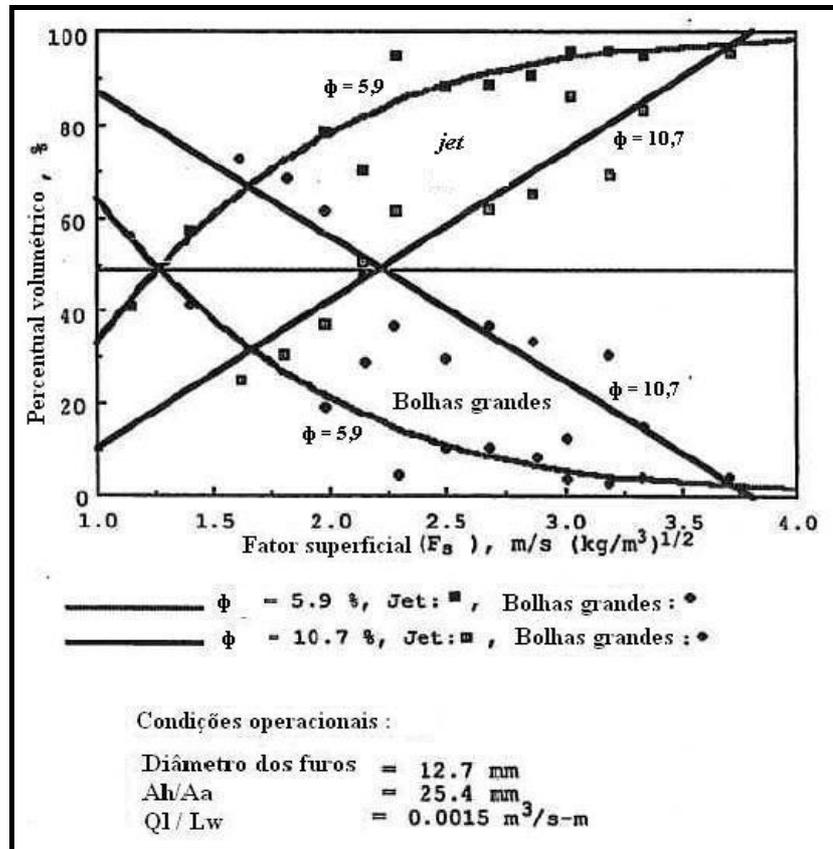


Figura 5.11: Percentual volumétrico de *jetting* e bolhas grandes em função do fator F_s variando a fração de área perfurada do prato, ϕ (PRADO, 1986)

Na Figura 5.12, Prado (1986) mostrou também que quanto maior Q_L/L_w , menor o parâmetro F_J .

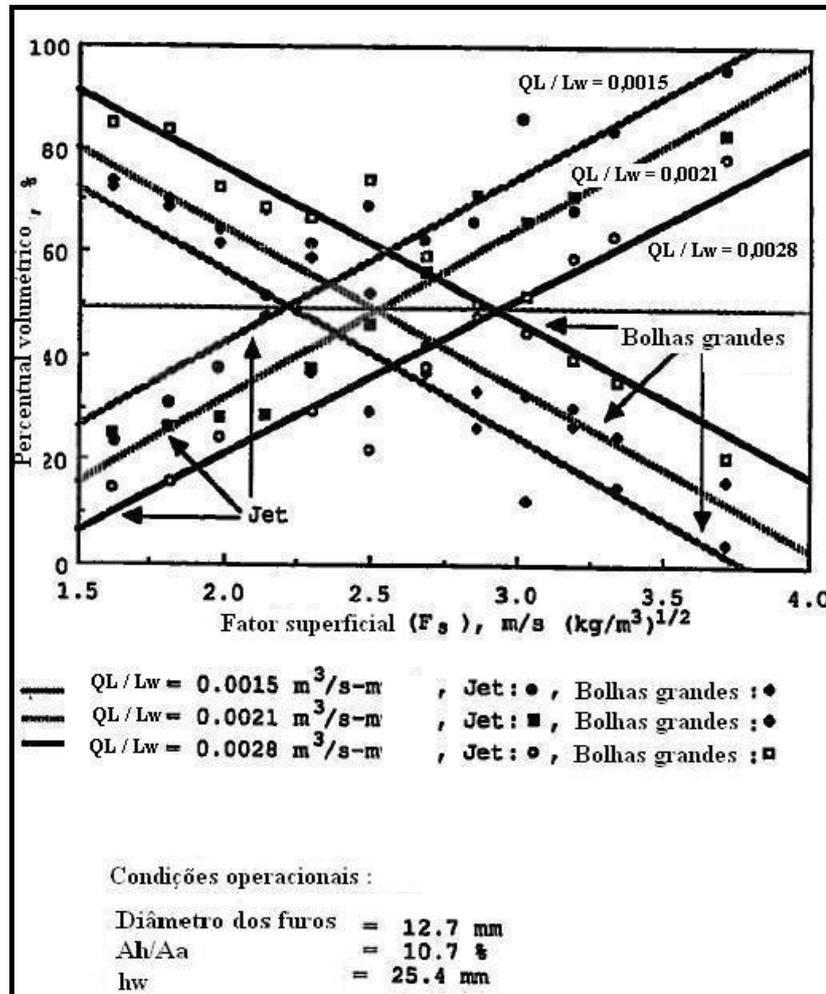


Figura 5.12: Percentual volumétrico de *jetting* e bolhas grandes em função do fator F_S variando a vazão de líquido, Q_L/L_w (PRADO, 1986)

5.3 RESULTADOS DE EFICIÊNCIA GLOBAL

A eficiência global real das colunas industriais foi obtida no simulador comercial Aspen Plus 12.1. As colunas foram modeladas com *Radfrac*, conforme fluxograma das Figuras 5.1, 5.2 e 5.3. Foram informadas a composição, temperatura, pressão e vazão de carga; vazões de destilado e de refluxo; perfil de pressão ao longo da coluna; temperatura de topo da coluna, mostrados no Apêndice B. Dentro do modelo *Radfrac*, no simulador Aspen

Plus 12.1, alterou-se a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), constante ao longo da coluna, até que as composições de topo e de fundo e o perfil de temperatura das colunas simuladas ficassem próximos dos respectivos valores reais de planta. Esse procedimento, para a estimativa da eficiência real das colunas, é chamado, ao longo do texto, de ajuste da eficiência global das colunas.

Todo o equacionamento dos modelos escolhidos para predição de eficiência, bem como dos modelos para fator de capacidade, modelos de mistura, arraste e gotejamento de líquido, modelos para altura de espuma, foram inseridos em linguagem *Fortran 77* no bloco *calculator* do simulador Aspen Plus 12.1, apresentados no Apêndice D.

5.3.1 Fracionadora de propeno (pratos *dualflow*)

A primeira coluna da Tabela 5.16 mostra os dados de planta, já com os erros no balanço de massa minimizados. A segunda coluna mostra o resultado do ajuste feito na eficiência global da coluna, no simulador Aspen Plus 12.1, visando atingir o teor molar de propano na corrente de topo, nesse caso, com erros de balanço de massa zerados. As demais colunas mostram os valores da eficiência global resultantes e composição da aplicação dos modelos de Garcia (1999) modificado no parâmetro FJ por este trabalho, do modelo de Garcia (1999) original e de Xu et al. (1994).

Para cada coluna procuraram-se identificar os períodos de tempo onde as condições operacionais estavam com baixa variabilidade (estados estacionários). O objetivo de se ter diversos casos é testar os modelos em diferentes condições operacionais visando avaliar a aplicabilidade dos modelos. As principais variáveis operacionais são as vazões de carga e refluxo e composição de carga. Para a Fracionadora de propeno, foram selecionados somente

dois períodos de coleta de dados, bastante similares, que foi de 1º de julho de 2002 a 1º de julho de 2004. Coletaram-se os dados nos dias 27 de maio de 2004 das 16 às 23 horas (Caso C) e no dia 17 de junho de 2004 das 20 às 21 horas (Caso D).

No Apêndice B-1 estão os dados completos da coluna Fracionadora de propeno com a justificativa de escolha destes casos. A Tabela B-1 mostra os dados geométricos do prato e as Tabelas B-2 e B-3 as condições operacionais das colunas e composições das correntes, respectivamente, com balanço de massa minimizado.

Tabela 5.16: Eficiências globais e composição das correntes da Fracionadora de propeno

	Planta	Ajuste no simulador	Garcia (1999) modificado	Garcia (1999)	Xu et al. (1994)	O'Connell (1946)
Caso D						
Composição de topo (% mol)						
propeno	99,5444	99,5445	99,4255	98,8754	99,6534	
propano	0,4495	0,4495	0,5685	1,1186	0,3407	
Composição de fundo (% mol)						
propeno	7,6262	7,6485	9,5668	18,6693	5,7756	
propano	90,9727	90,9711	89,0528	79,9571	92,8419	
E_{OC}		0,455	0,422	0,326	0,495	0,863
Caso C						
Composição de topo (% mol)						
propeno	99,5511	99,5551	99,4325	98,9515	99,6253	
propano	0,4427	0,4430	0,5656	1,0466	0,3728	
Composição de fundo (% mol)						
propeno	5,0114	4,5452	7,2202	17,8484	2,9992	
propano	93,5875	93,6401	90,9663	80,3480	95,1848	
E_{OC}		0,463	0,422	0,327	0,496	0,863

A Figura 5.13 mostra, para diversas condições operacionais, os valores de eficiência global da coluna calculados pelos modelos de predição de eficiência, comparados com os valores de eficiência global da coluna industrial.

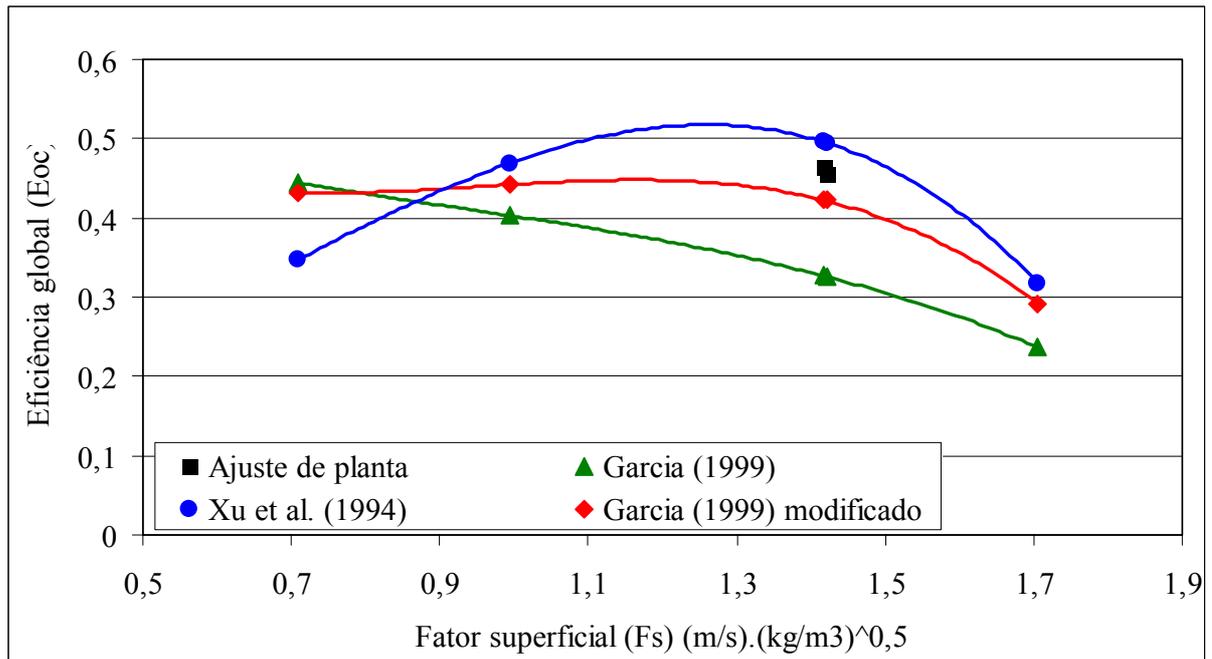


Figura 5.13: Comparação da eficiência global da coluna Fracionadora de propeno com os modelos de previsão

A Figura 5.14 mostra a influência do fator de inundação sobre a eficiência global da coluna. Após $FF = 1,0$ é esperada uma diminuição do valor da E_{OC} .

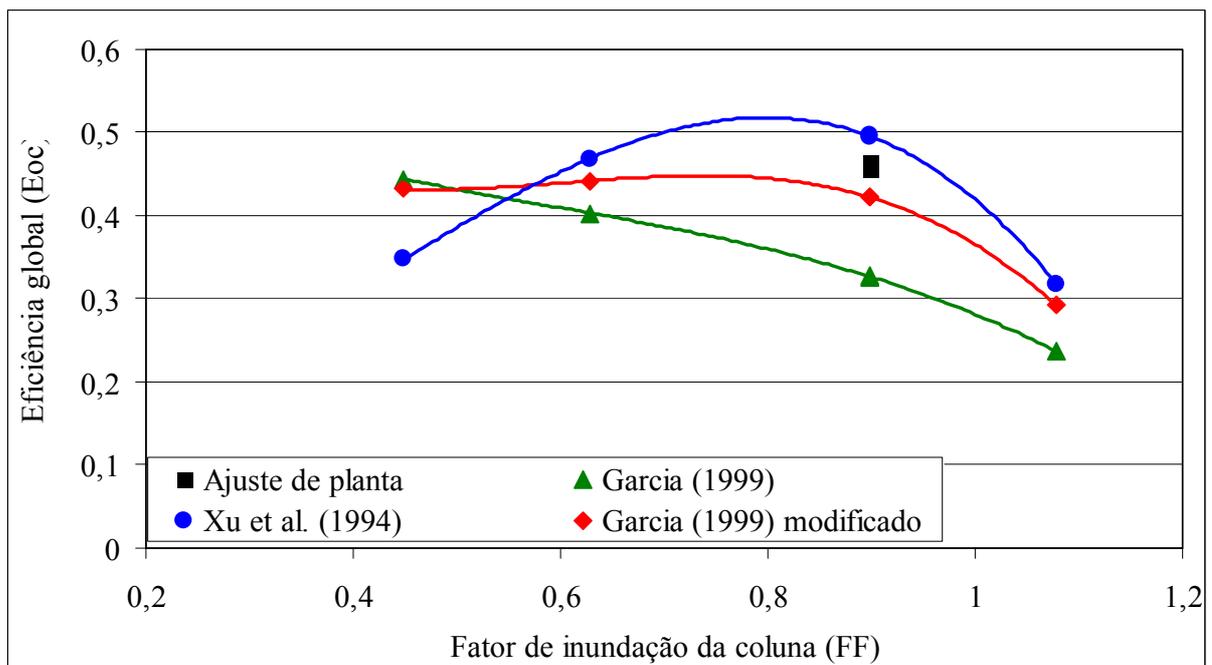


Figura 5.14: Influência do fator de inundação, FF , na eficiência global da coluna Fracionadora de propeno, para os diversos modelos de previsão de eficiência

5.3.2 Fracionadora de buteno-1 (pratos *dualflow*)

Do mesmo modo que a Tabela 5.16, para a Fracionadora de propeno, foi montada a Tabela 5.17, para a Fracionadora de buteno-1. A segunda coluna representa o ajuste da eficiência global no simulador até atingir a vazão mássica de n-butano na soma das correntes de destilado e gás combustível. Optou-se por esta forma, pois a verificação da composição de n-butano no destilado não é confiável, devido ao teor de n-butano no gás combustível, no simulador, não representar a realidade, devido à falta do parâmetro de interação binária buteno-1 / isobutano.

Ao contrário da Fracionadora de propeno, para a Fracionadora de buteno-1 se obtiveram quatro períodos de coleta de dados, com condições operacionais muito diferentes. Os períodos de coleta de dados, a geometria do prato, condições operacionais e composições das correntes são mostrados nas Tabelas B-4, B-5 e B-6. As diferentes condições operacionais obtidas tornaram o estudo desta coluna bastante enriquecedor. Inclusive, foi possível a realização de teste na coluna nas condições de projeto, com a perda de especificação do produto de topo buteno-1, mostrado no Caso R. Os Casos P e Q representam condições normais de operação desta coluna e o caso H uma condição de operação no limite inferior de vazões, com o produto de topo ainda especificado.

Tabela 5.17: Eficiências globais e composição das correntes de topo e fundo da Fracionadora de buteno-1

	Planta	Ajuste no simulador	Garcia (1999) modificado	Garcia (1999)	Xu et al. (1994)	O'Connell (1946)
Caso Q						
Vazão total de destilado + gás combustível (kg/h)						
buteno-1	5014	4997	5011	4954	5023	
n-butano	23,14	22,67	17,18	37,26	10,99	
Composição de fundo (% mol)						
buteno-1	17,1400	15,0089	14,8819	15,3345	14,7601	
n-butano	15,7600	16,7585	16,8102	16,6214	16,8684	
E_{OC}		0,449	0,474	0,401	0,516	0,808
Caso H						
Vazão total de destilado + gás combustível (kg/h)						
buteno-1	3505	3487	3512	3506	3513	
n-butano	13,74	12,68	2,49	5,45	1,57	
Composição de fundo (% mol)						
buteno-1	18,5950	18,0917	17,8318	17,8949	17,8172	
n-butano	13,3100	12,1129	12,2173	12,1870	12,2266	
E_{OC}		0,377	0,517	0,450	0,557	0,803
Caso P						
Vazão total de destilado + gás combustível (kg/h)						
buteno-1	5287	5263	5286	5254	5295	
n-butano	25,71	24,92	13,97	29,41	9,17	
Composição de fundo (% mol)						
buteno-1	21,8783	18,3799	18,1799	18,4565	18,1063	
n-butano	15,3467	16,2318	16,3234	16,1943	16,3636	
E_{OC}		0,439	0,495	0,421	0,537	0,805
Caso R						
Composição de topo, sem retirada de gás combustível (% mol)						
buteno-1	87,01	86,742	86,7023	85,7592	86,6714	
n-butano	0,29	0,2879	0,0425	0,0632	0,0370	
Composição de fundo (% mol)						
buteno-1	31,54	34,4502	34,4582	34,4483	34,4635	
n-butano	14,86	13,6721	13,7134	13,7100	13,7143	
E_{OC}		0,328	0,493	0,458	0,507	0,812

A Figura 5.15 mostra, para diversas condições operacionais, os valores de eficiência global da coluna calculados pelos modelos de predição de eficiência, comparados com os valores de eficiência global da coluna industrial por ajuste de planta.

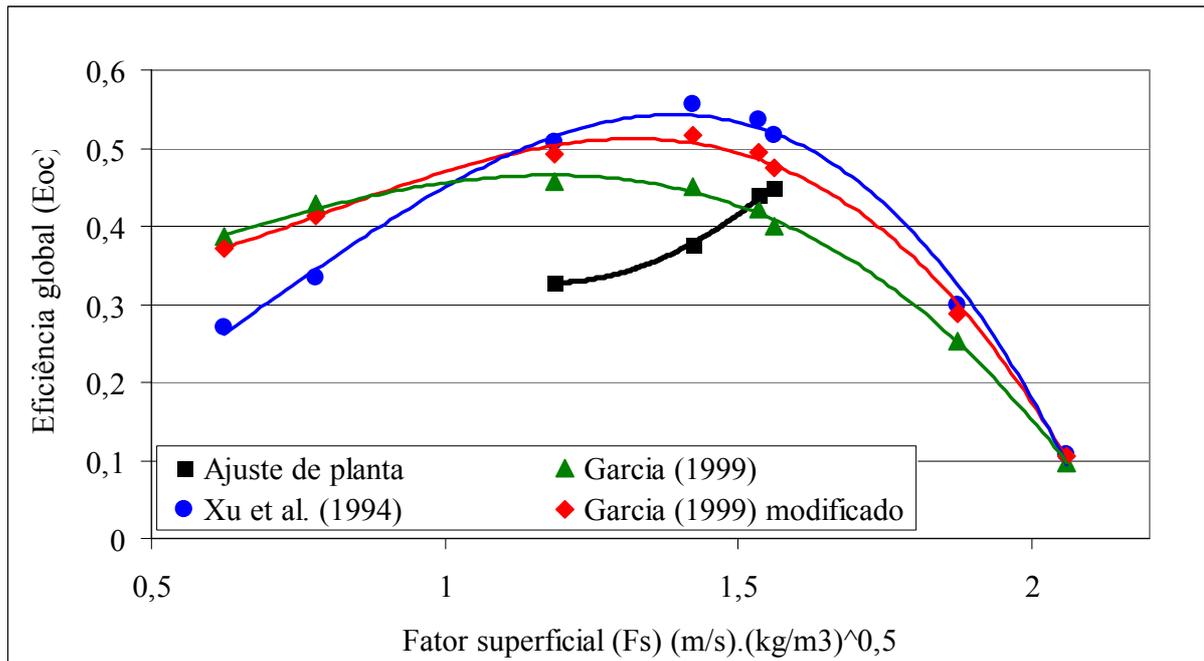


Figura 5.15: Comparação da eficiência global da coluna Fracionadora de buteno-1 com os modelos de predição

A Figura 5.16 mostra a influência do fator de inundação sobre a eficiência global da coluna.

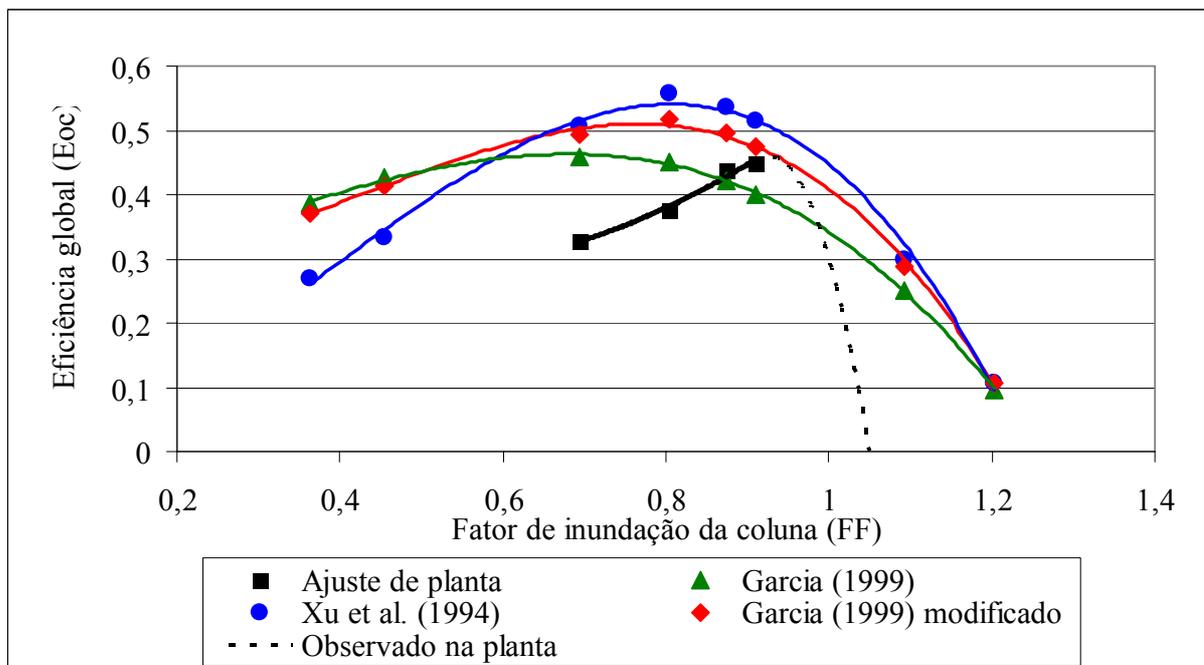


Figura 5.16: Influência do fator de inundação, FF , na eficiência global da coluna Fracionadora de buteno-1, para os diversos modelos de predição de eficiência

Os modelos para pratos *dualflow* não representaram tão bem a perda brusca de eficiência acima do fator de inundação 1,0. Após esse valor, há uma perda brusca de eficiência global da coluna, como é notado na prática e mostrado, para efeitos de ilustração, com as linhas pontilhadas na Figura 5.16.

Comparando o modelo de Garcia (1999) original com a modificação feita neste trabalho, ambos tiveram resultados similares, apesar de que no pico de eficiência, o modelo de Garcia (1999) modificado foi mais preciso.

Através do algoritmo implementado no simulador Aspen Plus 12.1, podem-se obter perfis das propriedades físicas, perfis das variáveis intermediárias das equações e correlações, perfis de eficiência, perfis hidráulicos, perfis de vazões, entre outros, como mostrado na Figura 5.17.

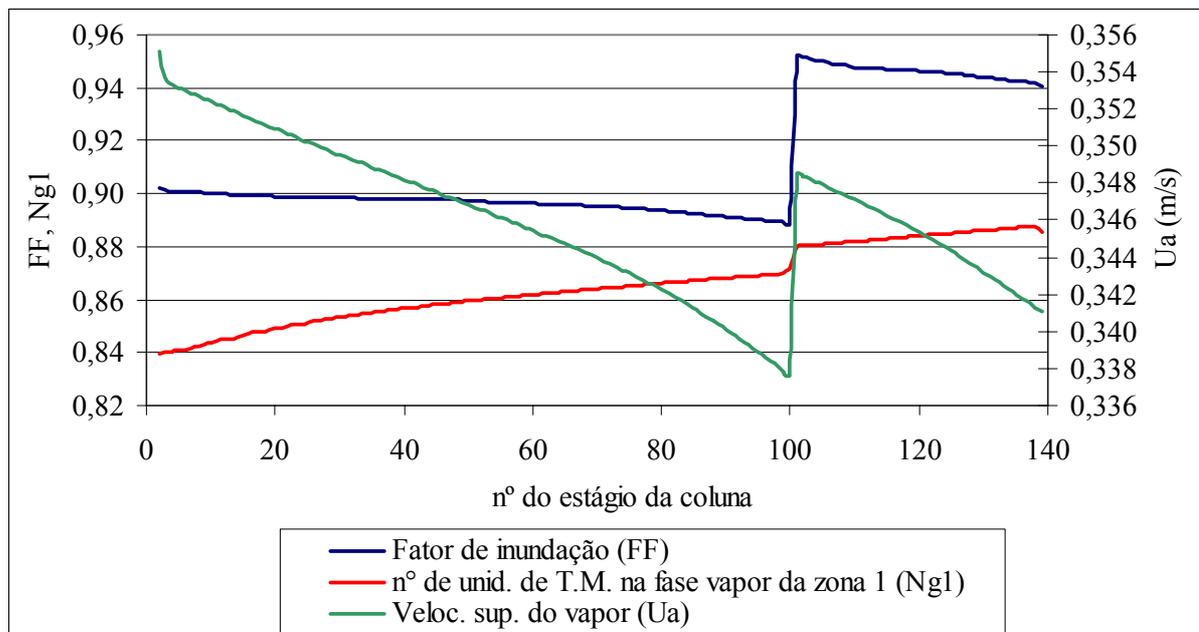


Figura 5.17: Exemplos de perfis gerados no simulador Aspen Plus 12.1 para a Fracionadora de buteno-1

5.3.3 Fracionadora de C6 (pratos valvulados)

Do mesmo modo que a Tabela 5.16, para a Fracionadora de propeno e que a Tabela 5.17, para a Fracionadora de buteno-1, foi montada a Tabela 5.18, para a Fracionadora de C6. A segunda coluna desta tabela representa o ajuste da eficiência global no simulador até atingir o teor mássico de tolueno no topo.

Obtiveram-se cinco períodos de coleta de dados, com condições operacionais muito diferentes. Os períodos de coleta de dados, a geometria do prato, condições operacionais e composições das correntes são mostrados nas Tabelas B-7, B-8 e B-9. Novamente, como no caso da Fracionadora de buteno-1, as condições operacionais obtidas são bem diferentes umas das outras, devido à especificação do produto de topo ser mais flexível quanto ao teor de tolueno e a este teor ser menos sensível às variações de vazões de carga e refluxo.

Tabela 5.18: Eficiências globais e composição das correntes da Fracionadora de C6

	Planta	Ajuste no simulador	Garcia (1999) modificado	Garcia (1999)	Chan e Fair (1984)	O'Connell (1946)
Caso J						
Composição de topo (% massa)						
benzeno	83,1000	83,5294	83,5121	83,5090	83,5407	
tolueno	0,0010	0,0010	0,0009	0,0011	0,0002	
Composição de fundo (% massa)						
benzeno	0,9600	0,9590	0,9827	0,9869	0,9436	
tolueno	53,2900	53,7111	53,7113	53,7110	53,7123	
<i>E_{OC}</i>		0,832	0,808	0,791	1,071	0,559
Caso K						
Composição de topo (% massa)						
benzeno	85,13	85,2311	85,2213	85,2189	85,2429	
tolueno	0,0021	0,0021	0,0019	0,0023	0,0004	
Composição de fundo (% massa)						
benzeno	1,0050	1,0034	1,0168	1,0201	0,9873	
tolueno	56,0050	56,3307	56,3310	56,3304	56,3330	
<i>E_{OC}</i>		0,845	0,809	0,791	1,070	0,560
Caso L						
Composição de topo (% massa)						
benzeno	84,726	84,9431	84,9285	84,9256	84,9589	
tolueno	0,0005	0,0005	0,0006	0,0008	0,0001	
Composição de fundo (% massa)						
benzeno	0,4370	0,4338	0,4558	0,4601	0,4100	
tolueno	57,1830	58,0893	58,0892	58,0890	58,0900	
<i>E_{OC}</i>		0,846	0,808	0,792	1,052	0,558
Caso M						
Composição de topo (% massa)						
benzeno	81,9690	81,8290	81,8194	81,8162	81,8446	
tolueno	0,0045	0,0045	0,0034	0,0041	0,0010	
Composição de fundo (% massa)						
benzeno	1,1870	1,1805	1,1931	1,1972	1,1600	
tolueno	53,0600	52,4739	52,4755	52,4745	52,4787	
<i>E_{OC}</i>		0,837	0,811	0,793	1,078	0,559
Caso B						
Composição de topo (% massa)						
benzeno	79,0430	79,0646	79,0810	79,0785	79,1022	
tolueno	0,0030	0,0030	0,0004	0,0005	0,0001	
Composição de fundo (% massa)						
benzeno	1,1410	1,1453	1,1196	1,1234	1,0862	
tolueno	53,0300	53,0052	53,0094	53,0093	53,0099	
<i>E_{OC}</i>		0,673	0,817	0,797	1,085	0,564

A Figura 5.18 mostra, para diversas condições operacionais, os valores de eficiência

global da coluna calculados pelos modelos de predição de eficiência, comparados com os valores de eficiência global da coluna industrial. A Figura 5.19 mostra a influência do fator de inundação sobre a eficiência global da coluna.

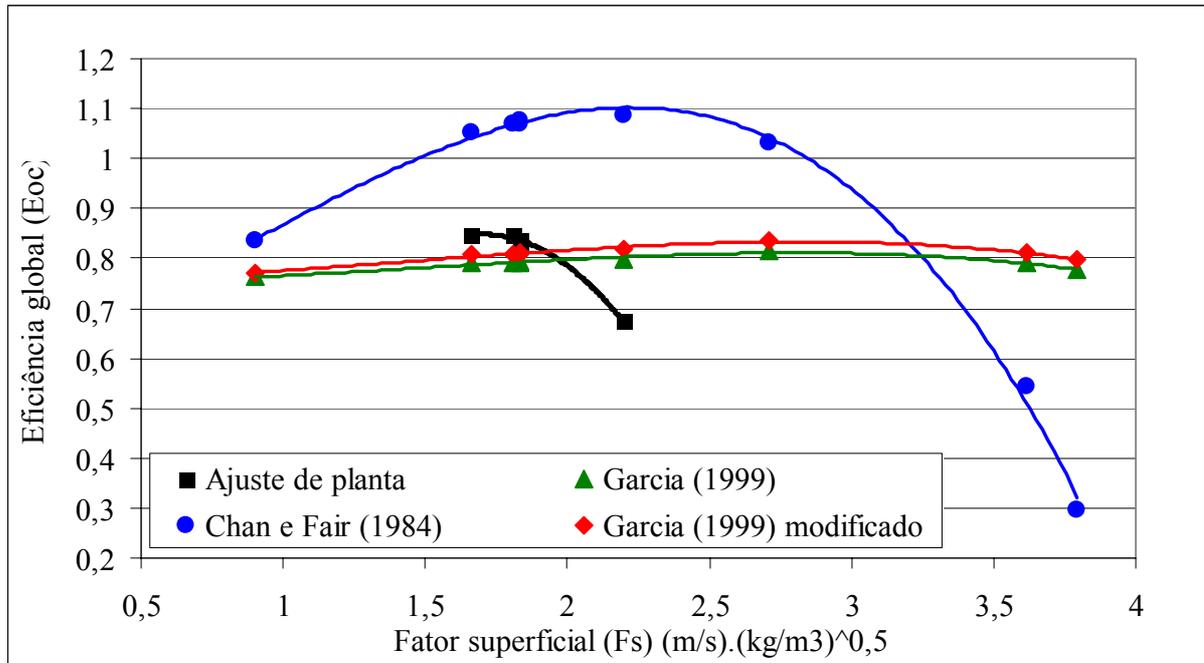


Figura 5.18: Comparação da eficiência global da coluna Fracionadora de C6 com os modelos de predição

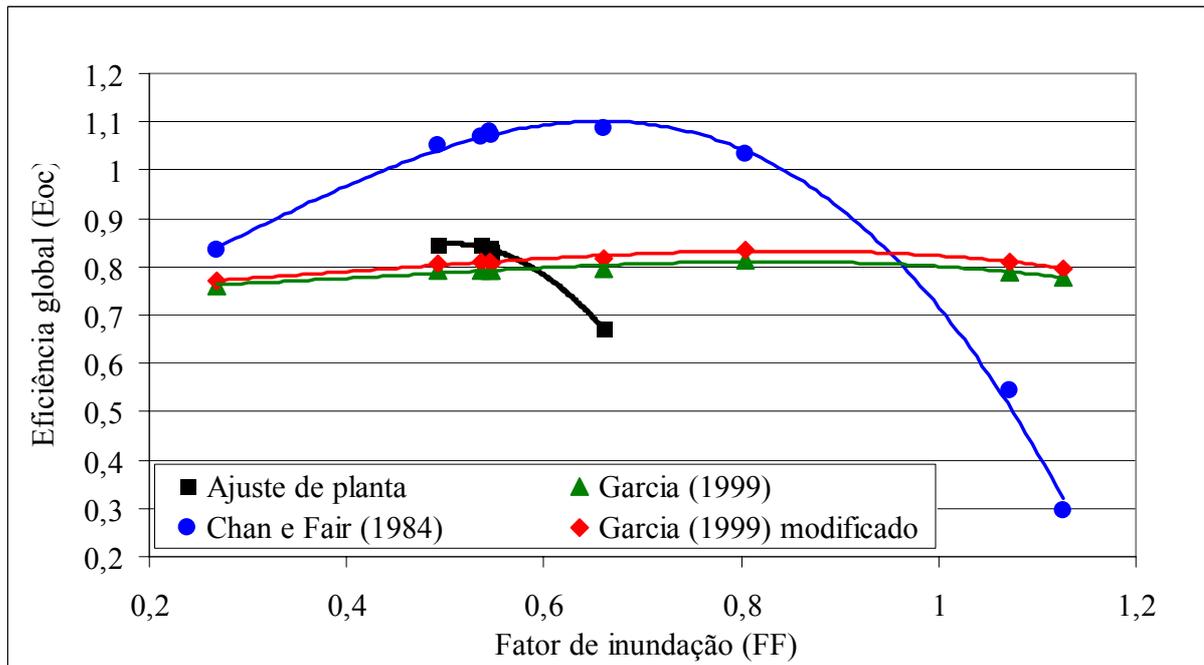


Figura 5.19: Influência do fator de inundação, FF , na eficiência global da coluna Fracionadora de C6, para os diversos modelos de previsão de eficiência

A correlação de Fair (1961) utilizada para estimar o fator de inundação da coluna industrial é conservador, como mostrado na Figura 5.19, pois prevê uma perda na eficiência global da coluna com fator de inundação de apenas de 0,70. Na coluna industrial se observa que esta perda de eficiência global ocorre próximo ao fator de inundação de 1,0. Ou seja, a correlação de Fair (1961) prevê a inundação da coluna muito antes do observado na coluna real. O efeito do fator de inundação não foi capturado pelo modelo de Garcia (1999). Já para o modelo de Chan e Fair (1984), o fator de inundação tem um efeito menos acentuado que na planta sobre a eficiência global da coluna.

5.4 ANÁLISE DOS RESULTADOS DOS MODELOS

O modelo de Garcia (1999) modificado mostrou-se satisfatório para os diversos dados de colunas reais. A correlação $FJ_{modificado}$ melhorou a estimativa da eficiência global (E_{OC}) das colunas com pratos *dualflow*, tanto no caso da Fracionadora de propeno como no da

Fracionadora de buteno-1. Para o caso da Fracionadora de C6 (pratos valvulados) houve pequena melhora na predição da eficiência global da coluna, em relação ao modelo de Garcia (1999) original.

Finalmente, os gráficos das Figuras 5.20, 5.21 e 5.22 mostram os dados de eficiência global observados versus calculados compilados das três colunas, usando cada modelo. Limites de $\pm 25\%$ são representados por serem razoáveis para o ajuste de sistemas tão diversos, geometrias, condições de operação, procedimentos analíticos, graus de não idealidade termodinâmica, erros de balanço de massa e outros desvios menores. Pode ser notado que para o modelo de Garcia (1999) modificado, dos 11 casos analisados, somente 1 ponto está fora dos limites, como mostrado na Figura 5.20. Para o modelo de Garcia (1999), sem modificação do parâmetro FJ , 3 pontos estão fora dos limites, como mostrado na Figura 5.21. E por último, para os modelos mais utilizados de Chan e Fair (1984), para pratos valvulados, e Xu et al. (1994) para pratos *dualflow*, 3 pontos estão fora dos limites de $\pm 25\%$, como mostrado na Figura 5.22.

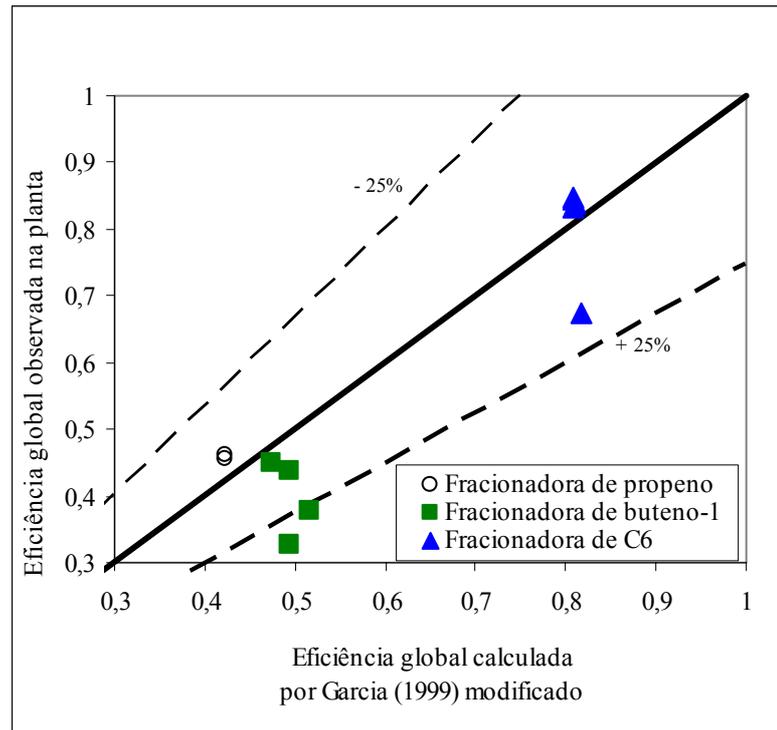


Figura 5.20: Comparação entre a eficiência global calculada por Garcia (1999) modificado e valores observados das colunas reais

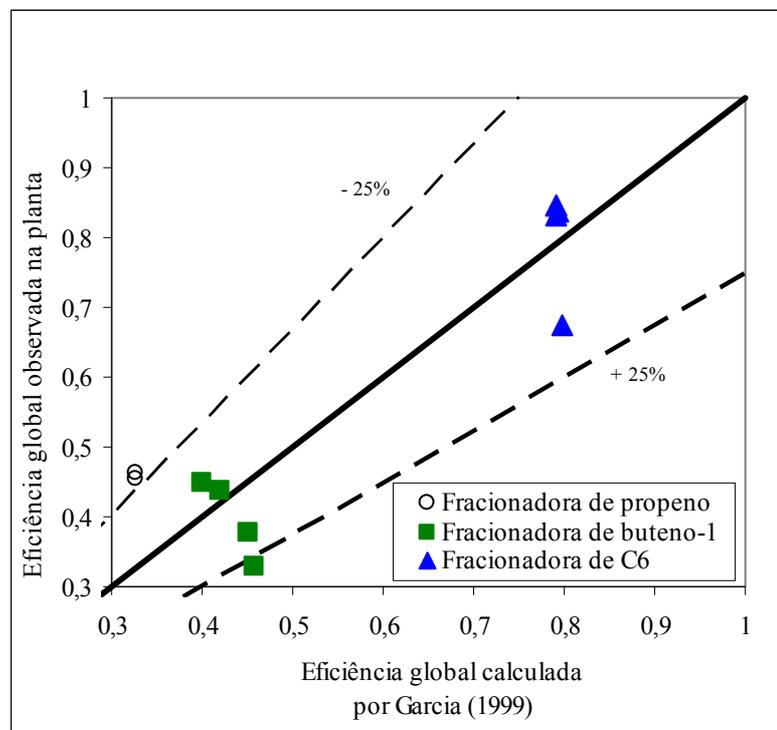


Figura 5.21: Comparação entre a eficiência global calculada por Garcia (1999) e valores observados das colunas reais

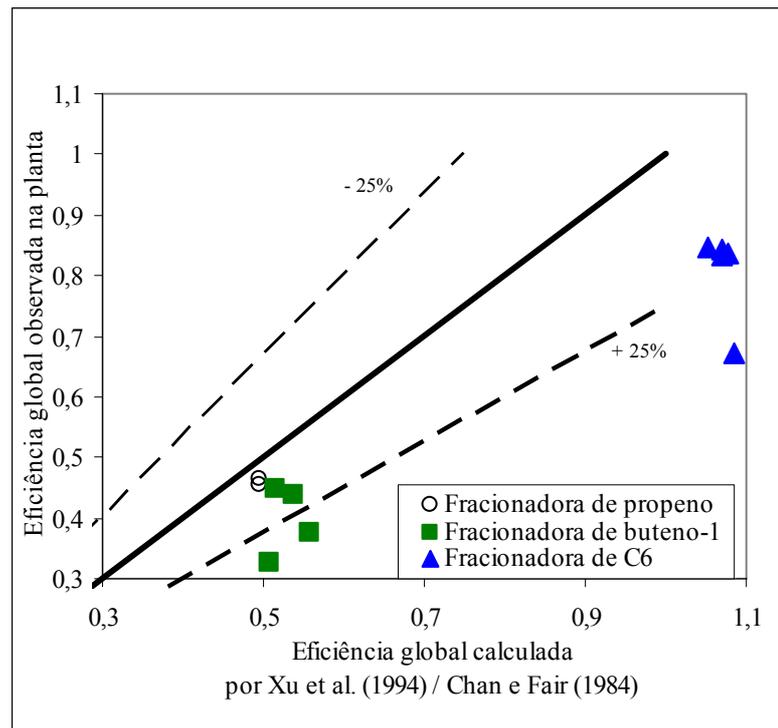


Figura 5.22: Comparação entre a eficiência global calculada por Chan e Fair (1984) e Xu et al. (1994) e valores observados das colunas reais

Na Tabela 5.19 são mostrados, para as três colunas de destilação usadas neste trabalho, para todos casos, os resultados obtidos para *FJ* original, usando a correlação de Prado (1986) (Equação 4.1), e para *FJ* modificado neste trabalho (Equação 4.5). O parâmetro *FJ* original foi usado no modelo de predição da eficiência de Garcia (1999) e *FJ* modificado no modelo de Garcia (1999) modificado.

Como já comentado na Seção 5.2, no caso dos pratos *dualflow*, *FJ* modificado representou melhor a fração de furos em *jetting* do que a correlação *FJ* original. No caso dos pratos valvulados, é provável que *FJ* assumira um valor intermediário entre os preditos pelos dois modelos, apesar de que a predição de eficiência com Garcia (1999) modificado chegou mais perto dos valores da coluna real, como se tinha comentado na Seção 5.2.2.

Tabela 5.19: Comparação da eficiência global calculada pelo modelo de Garcia (1999), utilizando *FJ* de Prado (1986) e *FJ* modificado neste trabalho

Caso	<i>FJ</i>		Eficiência global da coluna (E_{OC})		
	Prado (1986)	Modificado neste trabalho	Garcia (1999)	Garcia (1999) modificado	Coluna real ajustada
Fracionadora de propeno (<i>dualflow</i>)					
D	0,016	0,449	0,326	0,422	0,455
C	0,016	0,448	0,327	0,422	0,463
Fracionadora de buteno-1 (<i>dualflow</i>)					
Q	0,035	0,467	0,401	0,474	0,449
H	0,026	0,424	0,450	0,517	0,377
P	0,034	0,457	0,421	0,495	0,439
R	0,0096	0,359	0,493	0,493	0,328
Fracionadora de C6 (valvulado)					
J	0,147	0,467	0,791	0,808	0,832
K	0,145	0,460	0,791	0,809	0,845
L	0,130	0,425	0,792	0,808	0,846
M	0,148	0,467	0,793	0,811	0,837
B	0,181	0,556	0,797	0,817	0,673

CONCLUSÕES

O algoritmo implementado no simulador Aspen Plus 12.1 em linguagem Fortran 77 se mostrou bastante prático, pois permite a mudança das condições operacionais de cada coluna de forma rápida, é de rápida convergência, calcula a eficiência de cada prato baseada nos parâmetros daquele prato e gera diversos perfis.

O modelo de Garcia (1999) modificado para estimar a eficiência de ponto por zonas de transferência de massa, utilizado neste trabalho, em conjunto com as modificações propostas por Garcia e Fair (2002) específicas para pratos *dualflow*, representou satisfatoriamente o desempenho dos pratos *dualflow* (sem *downcomers* e escoamento contracorrente). Os desempenhos das colunas Fracionadoras de buteno-1 e de propeno foram melhores representados pelo modelo modificado neste trabalho do que pelas modelagens antecessoras feitas por Garcia (1999) e por Xu et al. (1994).

Este trabalho é uma das primeiras tentativas de uso das correlações propostas por Garcia e Fair (2002) para estimativa da capacidade do prato (C_{SB}), arraste de líquido e gotejamento e determinação da altura do líquido claro de pratos *dualflow*, em colunas industriais.

As colunas industriais trabalham quase 99 % do tempo na faixa de fator de inundação de 0,9 a 1,0, sendo esta, portanto, a faixa de operação mais importante para prever a eficiência global da coluna. Em vista disto, decorre outra vantagem do modelo de Garcia (1999) modificado para pratos *dualflow*, pois representou a eficiência global das colunas, dentro dessa faixa de operação, mais próximo da realidade da planta do que usando o modelo original de Garcia (1999).

A aplicação do modelo de Garcia (1999) modificado para a coluna Fracionadora de C6 ainda merece um certo cuidado, pois se acredita que há uma superestimativa do valor de FJ , ao passo que o modelo de Garcia (1999) subestima esse fator. Ambos modelos foram melhores que o proposto por Chan e Fair (1984).

A correção do parâmetro FJ , neste trabalho, parece ser coerente com a fração de *jetting* esperada para as colunas com pratos *dualflow* testadas. A correlação original de Prado (1986) foi desenvolvida para pratos perfurados com *downcomer*, assim sua extensão para pratos *dualflow* é bastante ruim, com resultados de FJ muito abaixo do esperado para esse tipo de prato, enquanto a modificação proposta neste trabalho resultou em valores de FJ mais coerentes. Já o uso da correlação original de Prado (1986) em pratos valvulados mostrou valores de FJ abaixo do esperado para esse tipo de prato e a modificação proposta gerou valores de FJ acima do esperado. O resultado da eficiência global da coluna usando Garcia (1999) modificado em FJ teve resultados mais próximos das eficiências globais da coluna industrial de pratos valvulados.

Estimativas precisas da altura da espuma e da dinâmica dos furos para cada tipo de prato e sistema tornariam os modelos de eficiência bem mais precisos. Esses parâmetros

dependem basicamente de fatores hidráulicos, facilmente obtidos com uma coluna piloto. Tal investimento evitaria que as empresas petrolíferas, químicas e petroquímicas perdessem capital investido e produção com projetos de baixa qualidade quanto à eficiência de prato.

A utilização do simulador Aspen Plus 12.1 facilitou a implementação dos conjuntos de correlações e o teste de suas influências na eficiência global das colunas. Alguns detalhes poderiam ser melhorados pela Aspen Technology Inc., como: permitir que a variável eficiência seja um vetor, facilitar o acesso e visualização dos resultados parciais das correlações em cada prato, calcular as difusividades de binários em uma mistura multicomponente. Como sugestão, a Aspen Technology Inc. poderia criar blocos com os diversos modelos de eficiência, como no algoritmo apresentado neste trabalho, visando uma rápida escolha e utilização por usuários não profundamente familiarizados com os modelos de eficiência. Isto proporcionará a obtenção de uma estimativa rápida, durante uma simulação de uma coluna, com fins de avaliação de propostas de fornecedores de bandejas e projetos de novas colunas de destilação.

Como as publicações sobre transferência de massa e hidráulica em pratos são muito dinâmicas e como neste trabalho foram apresentados modelos específicos para pratos valvulados com passe simples e para pratos *dualflow*, poderá ser explorada em trabalhos futuros a extensão desse trabalho para pratos perfurados, pratos com duplo passe, bandejas de última geração, como a *Superfrac* da Glitsch e bandejas de alta capacidade *Multidowncomer* da UOP, ambas existentes em colunas da COPESUL.

Outra sugestão é fazer modelagens no Aspen Plus 12.1 da hidráulica e eficiência em colunas recheadas, que estão sendo cada vez mais utilizadas nos novos projetos.

REFERÊNCIAS

API Technical Data Book, Petroleum Refining, 4 ed.

ASPEN TECHNOLOGY INC. *Physical Property Methods and Models*: versão 10.2. Manual de uso do software. Cambridge, EUA: Aspen Technology Inc., fev. 2000.

BEAUDOIN, M. *Physical properties*. AspenTech Support. Mensagem recebida por: <tito@copesul.com.br> em 17 fev. 2005.

BENNETT, D. L.; WATSON, D. N.; WIESCINSKI, M. A. New Correlation for Sieve-Tray Point Efficiency, Entrainment and Section Efficiency. *AIChE Journal*, v. 43, n. 6, p. 1611-26, jun. 1997.

BIRNFELD, E. Programa de computador para identificação de estados estacionários. Não publicado. 2004.

CHAN, H.; FAIR, J. R. Predict of Point Efficiencies on Sieve Trays. 1. Binary Systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 23, n. 4, p. 814-9, 1984.

CHAN, H.; FAIR, J. R. Prediction of Point Efficiencies on Sieve Trays. 2. Multicomponent Systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 23, n. 4, p. 820-7, 1984.

CARMICHAEL, L. T.; HWANG, K. C.; BERRY, V. M.; SAGE, B. H. Phase Behavior in a Six-Component Hydrocarbon System. *Journal of Chem. Eng.*, v. 7, n. 3, p. 331-6, jul. 1973.

CHEN, G. X.; CHUANG, K. T. Determining the Number of Gas-Phase and Liquid-Phase Transfer Units from Point Efficiencies in Distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, n. 4, p. 907-13, 1994.

CROWE, C. M.; CAMPOS, Y. A. G.; HRYMAK, A. Reconciliation of Process Flow Rates by Matrix Projection. 1. Linear Case. *AIChE Journal*, v. 29, n. 6, p. 881-8, nov. 1983.

FERREIRA, C. *Manual de uso da sub-rotina para cálculo da eficiência de pratos de colunas*: versão 4.0. São Paulo: AspenTech Brasil Ltda., 2000.

GARCIA, J. A. *Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency: Hydrocarbon and Aqueous Systems*. Austin: The University of Texas at Austin, 1999. Tese (Doutorado em Engenharia Química), The University of Texas at Austin, 1999.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. A Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency. 1. Database Development. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, n. 6, p. 1809-17, 2000.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. A Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency. 2. Model Development and Validation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, n. 6, p. 1818-25, 2000.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. Distillation Sieve Trays without Downcomers: Prediction of Performance Characteristics. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 41, n. 6, p. 1632-40, 2002.

GLITSCH. *Ballast Tray Design Manual*: Bulletin n° 4900. Informações de fabricantes. Dallas, EUA: Glitsch Inc., 1974. 5.ed.

GMEHLING, J.; ONKEN, U.; KOLBE, B. *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection*. Frankfurt: Dechema, 1983. 687 p. (Aliphatic Hydrocarbons, v. 1, parte 6a).

GMEHLING, J.; ONKEN, U.; KOLBE, B. *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection*. Frankfurt: Dechema, 1983. 506 p. (Aliphatic Hydrocarbons, v. 1, parte 6b).

GMEHLING, J.; ONKEN, U.; KOLBE, B. *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection*. Frankfurt: Dechema, 1983. 563 p. (Aromatic Hydrocarbons, v. 1, parte 7).

GMEHLING, J.; LI, J.; SCHILLER, M. A Modified UNIFAC Model. 2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 32, p. 178-93, 1993.

HAYDEN, J.G.; O'CONNELL, J. P. A Generalized Method for Predicting Second Virial Coefficients. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 14, n. 3, p. 209 – 16, 1974.

HUGHMARK, G. A. Point Efficiencies for Tray Distillations. *Chem. Eng. Progress*, v. 61, n. 7, p. 97-100, jul. 1965.

HUTCHINSON, M. H.; BADDOUR, R. F. Ripple Trays: a new tool for vapor-liquid contacting. *Chem. Eng. Progress*, v. 52, n. 12, p. 503-8, 1956.

ILME, J.; AITTAMAA, J. Short introduction to use Flowbat to calculate real plate behavior. Não publicado. [2003 ?].

JORGE, L. M. *Equilíbrio de Fases – Butadieno/Extratora 01*: Comparação dos dados experimentais com UNIFAC. Triunfo: Copesul, ago. 1989a. Relatório parcial 04.

JORGE, L. M. *Equilíbrio de Fases - Estudo da Splitter de Propano / Propeno*. Triunfo: Copesul, 1989b. Relatório parcial.

KISTER, H. Z; BROWN, E.; SORENSEN, K. Sensitivity analysis is key to successful DC5 simulation. *Hydrocarbon Processing*, p. 124-32, 1998.

- KISTER, H. Z. *Distillation Design*. New York: McGraw-Hill Inc., 1992. 710 p.
- KLEMOLA, K. T.; ILME, J. K. Distillation Efficiencies of an Industrial-Scale i-Butane / n-Butane Fractionator. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 35, n. 12, p. 4579-86, 1996.
- KLEMOLA, K. T.; ILME, J. K. Calculation Methods for the Numbers of Transfer Units on Sieve Trays. In: AIChE Annual Meeting, 1997a, Los Angeles.
- KLEMOLA, K. T.; ILME, J. K. Effect of Two-Pass Trays on Distillation Efficiencies. *Chem. Eng. Technol.*, v. 20, n. 7, p. 478-84, 1997b.
- KOCH-GLITSCH. *Superfrac Trays*. Wichita, EUA, 2000. CATÁLOGO.
- KOZIOL, A.; MACKOWIAK, J. Liquid Entrainment in Tray Columns with Downcomers. *Chem. Eng. Process.*, v. 27, p. 145-53, 1990.
- KOZIOL, A.; MACKOWIAK, J. A New Method for determining the Efficiency of Tray Columns with Downcomers. *Chem. Eng. Technol.*, v. 15, p. 103-13, 1992.
- LEE, B. I.; KESLER, M.G. *AIChE Journal*, v. 21, p. 510, 1975.
- LOCKETT, M. J. *Distillation Tray Fundamentals*. Cambridge: Cambridge University Press, 1986. 226 p.
- LOPES FILHO, D. F. Equilíbrio Líquido-Vapor: estado da Arte. *Revista Brasileira de Eng. Química*, v. 9, n. 3, ago. 1986.
- MACFARLAND, S. A.; SIGMUND, P. M.; VAN WINKLE, Matthew. Predicting Distillation Efficiency. *Hydrocarbon Processing*, 1972.
- MATHIAS, P.M.; KLOTZ, H.C.; PRAUSNITZ, J. M. Equation-of-State mixing rules for multicomponent mixtures: the problem of invariance. *Fluid Phase Equilibria*, v. 67, p. 31-44, 1991.
- NARASIMHAN, S.; MAH, R. S. H.; TAMHANE, A. C.; WOODWARD, J. W.; HALE, J. C. A Composite Statistical Test for Detecting Changes of Steady States. *AIChE Journal*, v. 32, n. 9, p. 1409-18, 1986.
- PRADO, M. *The bubble-to-spray transition on sieve trays: mechanisms of the phase inversion*. Austin: The University of Texas at Austin, 1986. Tese (Doutorado em Engenharia Química), The University of Texas at Austin, 1986.
- PRADO, M.; JOHNSON, K. L., FAIR, J. R. Bubble-to-Spray Transition on Sieve Trays, *Chem. Eng. Progress*, p. 32-40, 1987.
- PRADO, M.; FAIR, J. R. Fundamental Model for the Prediction of Sieve Tray Efficiency. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 29, n. 6, p. 1031-42, 1990.
- RACKETT, H. G.; *Journal Chem. Eng. Data*, v. 15, p. 514, 1970.
- REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. *The Properties of Gases and Liquids*. 4. ed. New York: McGraw-Hill, 1987.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. *The Properties of Gases and Liquids*. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1977.

SIGAL, R. *RK-Soave binary parameter*. AspenTech Support. Mensagem recebida por: <tito@copesul.com.br> em 9 ago. 2004.

STONE & WEBSTER. *High-Capacity Ripple Trays: The Second Generation*. Houston, [1997 ?]. CATÁLOGO.

VITAL, T. J.; GROSSEL, S. S.; OLSEN, P. I. Estimating Separation Efficiency 2. Plate Columns. *Hydrocarbon Processing*, p. 147-53, 1984.

WEIDLICH, U.; GMEHLING, J. A Modified UNIFAC Model 1. Prediction of VLE, h^E e γ . *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 26, p. 1372-81, 1987.

WEILAND, R. H. Hydraulic Stability of Dualflow Trays. In: AIChE Spring National Meeting, 2001, Houston, TX.

WINKLE, V. *Distillation*. New York: McGraw-Hill, 1967. 676 p.

XU, Z. P.; AFACAN, A.; CHUANG, K. T. Efficiency of Dualflow Trays in Distillation. *The Canadian Journal of Chem. Eng.*, v. 72, p. 607-13, 1994.

ZUIDERWEG, F. J. Sieve Trays: A View on the State of the Art. *Chem. Eng. Science*, v. 37, n. 10, p. 1441-64, 1982.

OBRAS CONSULTADAS

AITTAMAA, J.; KESKINEN, K. I. *FLOWBAT user's instruction manual*. Helsinki: Neste Engineering Oy, 1994. Disponível em: <<http://www.hut.fi/units/chemeng/webflowbat/index.html>> Acesso em: 21 fev. 2005.

BIDDULPH, M. W.; ROCHA, J. A.; BRAVO J. L.; FAIR, J. R. Point Efficiencies on Sieve Trays. *AIChE Journal*, v. 37, n. 8, p. 1261-4, 1991.

BILLET, R. Separation Tray without Downcomers. *Chem. Eng. Technol.*, v. 24, n. 11, p. 1103-12, 2001.

BRAVO, J. L.; MARKELOFF, R. G. New tray technology exceeds the capacity of structured packings and other trays by 20-30%. In: AIChE Spring Meeting, 1999, Houston.

CALDAS, J. N.; LACERDA, A. I. *Torres Recheadas*. Rio de Janeiro: Técnica, 1988. 266 p.

CALDAS, J. N. (org.). *Internos de Torres – Pratos e Recheios*. Rio de Janeiro: UERJ, 2003. 466 p.

DIONNE, D.; KURUKCHI, S. Caustic Tower Retrofit Using High Capacity Second Generation Ripple Tray Technology. In: AIChE Spring National Meeting, 1999, Houston.

DOLAN, M. J. *04T01 C4 Splitter Revamp*. Wichita: Koch-Glitsch, mar. 2004. Proposta comercial.

DRIBIKA, M. M.; BIDDULPH, M. W. Surface Tension Effects on a Large Rectangular Tray with Small Diameter Holes. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 26, p. 1489-94, 1987.

FAIR, J. R.; STEINMEYER, D. E.; PENNY, W. R.; CROCKER, B. B. Gas Absorption and Gas-Liquid System Design In: PERRY, Robert H. *Chem. Eng. Handbook*. 7.ed. New York: McGraw-Hill, 1999. p. 23-9. cap. 14.

FITZ, C. W.; KUNESH, J. G. Column hydraulics: system limit / ultimate capacity. *Chem. Eng. Journal*, v. 88, p. 11-19, 2002.

FOLDES, P.; EVANGELIDI, I. E. Efficiency of Turbogrid Tray Distillation Columns. *British Chem. Eng.*, v. 13, n. 9, p. 1291-93, 1968.

GILES, A. *Property Route*. AspenTech Support. Mensagem recebida por: <tito@copesusul.com.br> em 4 fev. 2005.

GMEHLING, J.; ONKEN, U.; KOLBE, B. *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection*. Frankfurt: Dechema, 1983. 643 p. (Aliphatic Hydrocarbons, v. 1, parte 6c).

GOEDEREN, C. W. J. Distillation tray efficiency and interfacial area. *Chem. Eng. Science*, v. 20, p. 1115-24, 1965.

HALE, A.; MORITZ, P. *04T01 C4 Splitter Revamp*. Tulsa, EUA: Sulzer Chemtech, out. 2003. Proposta comercial.

HIGH-PROCESS. *Mass Transfer Technology*. Wichita, EUA, 2003. CATÁLOGO EM CD.

KISTER, H. Z. Troubleshoot Distillation Simulations. *Chem. Eng. Progress*, p. 63-75, jun. 1995.

KISTER, H. Z. Can we believe the simulation results? *Chem. Eng. Progress*, p. 52-8, out. 2002.

KISTER, H. Z. What caused tower malfunctions in the last 50 years ? *Trans IChemE*, v. 81, p. 5-26, 2003.

KISTER, H. Z. Component Trapping in Distillation Towers: Causes, Symptoms and Cures. *Chem. Eng. Progress*, p. 22-33, ago. 2004.

KISTER, H. Z. Diagnosing Instabilities in the Column Overhead. *Chem. Eng.*, p. 56-9, set. 2004.

KNUDSEN, J. G.; HOTTEL, H. C.; SAROFIM, A. F. et al. Heat and Mass Transfer. In: PERRY, Robert H. *Chem. Eng. Handbook*. 7.ed. New York: McGraw-Hill, 1999. p. 1-59. cap. 5.

KOCH-GLITSCH. *Flexitray Valve Trays*. Wichita, EUA, 2001. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *Ultrafrac Trays*. Wichita, EUA, 2001. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *Max-frac Trays*. Wichita, EUA, 2002. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *Provalve Valve Tray*. Wichita, EUA, 2002. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *High Performance Trays*. Wichita, EUA, 2003. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *Mass Transfer Technology*. São Paulo, 2004. CATÁLOGO EM CD.

KORCHINSKY, W. J. Liquid Mixing in Distillation Trays: Simultaneous Measurement of the Diffusion Coefficient and Point Efficiency. *Trans IChemE*, v.72, p. 472-8, 1994.

KOSHY, T. D.; RUKOVENA, F. Distillation Pilot Plant Design, Operating Parameters, and Scale-Up Considerations. *The Chemical Engineers' Resource Page*. Disponível em: <www.cheresources> Acesso em: 26 ago. 2003.

- KREYSZIG, E. *Advanced Engineering Mathematics*. 7.ed. [s.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 1993.
- LOCKETT, M. J.; SAFEKOURDI, A. The Effect of the Liquid Flow Pattern on Distillation Plate Efficiency. *The Chem. Eng. Journal*, v. 11, p. 111-21, 1976.
- LOCKETT, M. J.; DHULESIA, H. A. Murphree Plate Efficiency with Nonuniform Vapour Distribution. *The Chem. Eng. Journal*, v. 19, p. 183-8, 1980.
- LOCKETT, M. J.; RAHMAN, M. A.; DHULESIA, H. A.; The Effect of Entrainment on Distillation Tray Efficiency. *Chem. Eng. Science*, v. 38, n. 5, p. 661-72, 1983.
- LOCKETT, M. J.; AUGUSTYNIAK, J. D. Parallel-flow Slotted Sieve Tray Efficiency. *Gas Separation and Purification*, v.6, n. 4, p. 215-9, 1992.
- MILLER, I.; FREUND, J. E.; JOHNSON, R. A. *Probability and Statistics for Engineers*. 4.ed. New Jersey: Prentice Hall, 1990.
- MOURA, C. A. D. *Eficiência de pratos com borbulhadores*. [s.l.]: Petrobrás, 1970. Apostila.
- NICOLAIEWSKY, E. M. A. *Simulação de Bandejas Corrugadas*. Rio de Janeiro: Escola de Química da UFRJ, ago. 1999. Parte 1: Pesquisa Bibliográfica.
- NICOLAIEWSKY, E. M. A. *Simulação de Pratos Corrugados*. Rio de Janeiro: Escola de Química da UFRJ, 2000. Relatório final.
- NORTON CHEMICAL PROCESS. *Valve Tray Design Manual*. Manual de projeto. Akron, EUA: Norton Chemical Process, 1999.
- PENCIAKOVA, E. *04T01 C4 Splitter*. Koch-Glitsch. Mensagem recebida por: <tito@copesul.com.br> em 29 mar. 2004.
- PEREIRA, J.; CALDERBANK, P. H. The Prediction of Distillation Plate Efficiencies from Froth Properties. *Chem. Eng. Science*, v. 32, p. 1427-33, 1977.
- PERRY, D.; NUTTER, D. E. Debottleneck Entrainment Limited Columns using the MVG Tray. In: Debottlenecking Conference, 1994, Londres.
- PILLING, M. Effect of Downcomer Geometry on High Capacity Trays. In: AIChENational Meeting, 1998, EUA.
- SHARMA, M. M.; GUPTA, R. K. Mass Transfer Characteristics of Plate Columns without Downcomer. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 45, p. 169-75, 1967.
- SMAILI, F. *Distillation*. AspenTech Support. Mensagem recebida por: <tito@copesul.com.br> em 7 abr. 2003.
- STUPIN, W. J.; KISTER, H. Z. The Ultimate Capacity of Fractionators, *Trans IChemE*, v. 81, parte A, p. 136-146, jan. 2003.
- SULZER CHEMTECH. *Shell Mass Transfer Technology: Performance with Experience*. Winterthur, Switzerland, [s.d.]. CATÁLOGO.

SULZER CHEMTECH. *Trays for any application*. Winterthur, Switzerland, [s.d]. CATÁLOGO.

TAYLOR, R.; KRISHNA, R. *Multicomponent Mass Transfer*. New York: John Wiley & Sons Inc., 1993.

TAYLOR, R.; RAJAMANI, K.; KOOIJMAN, H. Real-World Modeling of Distillation. *Chem. Eng. Progress*, p. 28-39, jul. 2003.

VITAL, T. J.; GROSSEL, S. S.; OLSEN, P. I. Estimating Separation Efficiency 1. Introduction. *Hydrocarbon Processing*, p. 55-6, out. 1984.

YANAGI, T.; SAKATA, M. Performance of a Commercial Scale 14% Hole Area Sieve Tray. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 21, p. 712-7, 1982.

YANAGI, T. Inside a trayed distillation column. *Chemical Engineering*, p. 120-9, nov. 1990.

YIPING, W. *RK-Soave binary parameter in C3 splitter column*. AspenTech Support. Mensagem recebida por: <tito@copesul.com.br> em 23 ago. 2004.

APÊNDICE A – NOMENCLATURA

A_A	Área ativa do prato ou de borbulhamento ($A_T - 2.A_D$), m ²
A_D	Área do downcomer, m ²
A_H	Área perfurada do prato, m ²
A_N	Área <i>net</i> do prato ($A_T - A_D$), m ²
A_T	Área total da seção transversal da coluna, m ²
A_J	Fração de bolhas pequenas presentes na espuma
a	Área interfacial por unidade de volume, m ² /m ³
a'	Área interfacial por unidade de volume de vapor, m ² /m ³
\bar{a}	Área interfacial por unidade de volume de líquido, m ² /m ³
b	Intersecção da curva de equilíbrio para um binário
C	Constante da Equação 2.33
C_{SB}	Fator de capacidade do prato, m/s
De	Difusividade turbulenta (<i>eddy</i>) para a mistura líquida, m ² /s
D_G	Coefficiente de difusão molecular de um componente na mistura de vapor ou difusividade na fase vapor, m ² /s
D_L	Coefficiente de difusão molecular de um componente na mistura de líquido ou difusividade na fase líquida, m ² /s
d_1	Diâmetro do <i>jet</i> , m
d_{32}	Diâmetro médio <i>Sauter</i> da bolha, m
d_B	Diâmetro de bolha, m
d_{BL}	Média aritmética do diâmetro das bolhas grandes nas zonas 2 e 4, m
d_{BLS}	Diâmetro médio <i>Sauter</i> das bolhas grandes na zona 3, m
d_{BS}	Média aritmética do diâmetro das bolhas pequenas nas zonas 2 e 4, m
d_{BSS}	Diâmetro médio <i>Sauter</i> das bolhas pequenas na zona 5, m
d_C	Diâmetro do prato ou interno da coluna, m
d_H	Diâmetro do furo, m
d_{max}	Diâmetro máximo da bolha, m
E_{OC}	Eficiência global da coluna
E_{OG}	Eficiência de ponto
E_{MV}	Eficiência de prato de Murphree na fase vapor
E_{ML}	Eficiência de prato de Murphree na fase líquida
E_{MV}^a	Eficiência de Murphree aparente, leva em conta efeitos de arraste de líquido e gotejamento, para pratos valvulados.
E_{WI}	Eficiência aparente, leva em conta efeitos de arraste de líquido e gotejamento, para pratos <i>dualflow</i> .
FF	Fator de inundação
FJ	Fração dos furos ativos que estão em <i>jetting</i>
FLB	Fração dos furos ativos que estão produzindo bolhas grandes
FLC	Fração de furos que estão inativos (cobertos por líquido)
FP	Parâmetro de fluxo = $\frac{M_L}{M_G} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5}$
FPL	Comprimento do caminho do líquido sobre o prato, m
F_S	Fator superficial = $u_A \cdot \rho_G^{0,5}$, kg ^{0,5} ·m ^{-0,5} ·s ⁻¹
FSB	Fração dos furos ativos que estão produzindo bolhas pequenas
G'	Vazão molar de vapor por área de borbulhamento, kmol / (m ² ·s)
g	Aceleração da gravidade = 9,81 m/s ²

h_I	Altura do <i>jet</i> , m
h_B	Altura do leito no regime <i>spray</i> na Equação 3.27, m
h_{CL}	Altura do líquido claro, m
h_{CLD}	Altura do líquido claro dinâmico, m
h_F	Altura da espuma, m
h_W	Altura do vertedouro dos pratos com <i>downcomer</i> ou altura da ondulação dos pratos <i>dualflow</i> , m
K_{OG}	Coefficiente global de transferência de massa na fase vapor, kmol / (m ² .s)
k_G	Coefficiente de transferência de massa na fase vapor, kmol / (m ² .s)
k_L	Coefficiente de transferência de massa na fase líquida, kmol / (m ² .s)
k'_G	Coefficiente de transferência de massa na fase vapor, m/s
k'_L	Coefficiente de transferência de massa na fase líquida, m/s
(L'/L)	Fração de líquido arrastada em relação ao total de líquido descendo pela coluna
L'	Vazão molar de líquido por área de borbulhamento, kmol / (m ² .s)
L_W	Comprimento da corda de pratos com <i>downcomer</i> ou diâmetro da coluna em pratos <i>dualflow</i> , m
M_G	Vazão mássica de vapor, kg/s
M_L	Vazão mássica de líquido, kg/s
MW_G	Massa molecular da mistura de líquido, kg/kmol
MW_L	Massa molecular da mistura de vapor, kg/kmol
m	Inclinação da curva de equilíbrio de um sistema binário, dy / dx
N	Fluxo molar, kmol/(s.m ²)
N_G	Número de unidades de transferência de massa na fase vapor
N_{G1}	Zona 1
N_{G2L}	Zona 2, bolhas grandes
N_{G2S}	Zona 2, bolhas pequenas
N_{G3}	Zona 3
N_{G4L}	Zona 4, bolhas grandes
N_{G4S}	Zona 4, bolhas pequenas
N_{G5}	Zona 5
N_{G6}	Zona 6
N_{GFJ}	Zonas 1, 2 e 6
N_{GFLB}	Zonas 3, 4 e 6
N_{GFSB}	Zonas 5 e 6
N'_L	Número de unidades de transferência de massa na fase líquida, Equação 2.2
N_{L1}	Zona 1
N_{L2L}	Zona 2, bolhas grandes
N_{L2S}	Zona 2, bolhas pequenas
N_{L3}	Zona 3
N_{L4L}	Zona 4, bolhas grandes
N_{L4S}	Zona 4, bolhas pequenas
N_{L5}	Zona 5
N_{L6}	Zona 6
N_{LFJ}	Zonas 1, 2 e 6
N_{LFLB}	Zonas 3, 4 e 6
N_{LFSB}	Zonas 5 e 6
N_L	Número de unidades de transferência de massa na fase líquida, Equação 2.14
N_{OG}	Número global de unidades de transferência de massa na fase vapor
N_T	Número de estágios teóricos
N_R	Número de pratos reais da coluna

p	Distância entre furos (<i>pitch</i> triangular), m
Q_G	Vazão volumétrica de vapor, m ³ /s
Q_L	Vazão volumétrica de líquido, m ³ /s
T	Espessura do prato, m
T_s	Espaçamento entre pratos, m
t_G	Tempo de residência médio na fase vapor, s
t_{G1}	Tempo de residência do vapor no <i>jet</i> , s
t_{G2L}	Tempo de residência das bolhas grandes na dispersão da zona 2, s
t_{G2S}	Tempo de residência das bolhas pequenas na dispersão da zona 2, s
t_{G4L}	Tempo de residência das bolhas grandes na dispersão da zona 4, s
t_{G4S}	Tempo de residência das bolhas pequenas na dispersão da zona 4, s
t_{G3}	Tempo de residência das bolhas grandes na dispersão da zona 3, s
t_{G5}	Tempo de residência das bolhas pequenas na dispersão da zona 5, s
t_L	Tempo de residência médio na fase líquida, s
u_A	Velocidade superficial do gás baseado na área ativa (A_A) ou de borbulhamento (A_b), m/s
u_{AT}	Velocidade superficial do gás baseado na área ativa no ponto de transição do regime espuma para <i>spray</i> , m/s
$u_{A,0}$	Velocidade superficial do gás, baseado na área ativa, a 0 % de <i>jetting</i> , m/s
$u_{A,100}$	Velocidade superficial do gás, baseado na área ativa, a 100 % de <i>jetting</i> , m/s
u_{BSS}	Velocidade terminal de subida das bolhas d_{BSS} na zona 5, m/s
u_B	Velocidade de subida de uma simples bolha, m/s
u_F	Velocidade de inundação do prato, m/s
u_H	Velocidade do vapor através dos furos, m/s
u_J	Velocidade através dos <i>jets</i> , m/s
u_{SB}	Velocidade terminal de subida das bolhas pequenas (d_{BS}) nas zonas 2 e 4, m/s
u_{LB}	Velocidade terminal de subida das bolhas grandes (d_{BL}) nas zonas 2 e 4, m/s
u_{LB3}	Velocidade de subida das bolhas na zona 3, m/s
u_N	Velocidade superficial baseada na A_N , m/s
X_{LK}	Fração molar do pseudobinário chave leve no líquido
x_{hk}	Fração molar do chave pesado no líquido
x_{lk}	Fração molar do chave leve no líquido
x	Fração molar no líquido
x_i	Fração molar no líquido na interface
x_n	Valor de x no líquido deixando um ponto no prato n
$\overline{x_n}$	Valor médio de x no líquido deixando o prato n via <i>downcomer</i>
x^*	Fração molar no líquido que está em equilíbrio com o vapor
Y_{LK}	Fração molar do pseudobinário chave leve no vapor
y_{hk}	Fração molar do chave pesado no vapor
y_{lk}	Fração molar do chave leve no vapor
y	Fração molar no vapor
y_i	Fração molar no vapor na interface
y_n	Valor de y no vapor deixando um ponto no prato n
$\overline{y_n}$	Valor médio de y no vapor deixando o prato n
y^*	Fração molar no vapor que está em equilíbrio com o líquido
y_n^0	Valor de y no vapor deixando um ponto no prato n na saída do vertedouro
y_n^*	Fração molar no vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato n via <i>downcomer</i>

Letras gregas

α_E	Fração volumétrica de líquido efetiva na espuma, definida na Equação 2.34
α	Volatilidade relativa entre os componentes chaves
α	Fração volumétrica de líquido na espuma (<i>holdup</i> de líquido)
ε	Fração volumétrica de vapor na espuma (<i>holdup</i> de vapor)
θ	Tempo de contato de um elemento da interface gás-líquido, s
κ	Constante do modelo de Prado (1986)
λ	Razão entre a inclinação da curva de equilíbrio e da linha de operação

$$\lambda = m \cdot \left[\left(\frac{M_G}{MW_G} \right) / \left(\frac{M_L}{MW_L} \right) \right]$$

μ_G	Viscosidade da fase vapor, Pa.s = kg/(m.s) = N.s/m ²
μ_L	Viscosidade da fase líquida, Pa.s = kg/(m.s) = N.s/m ²
ρ_G	Massa específica da fase vapor, kg/m ³
ρ_L	Massa específica da fase líquida, kg/m ³
ρ'_G	Massa específica da fase vapor, kmol/m ³
ρ'_L	Massa específica da fase líquida, kmol/m ³
ρ_{AR}	Massa específica do ar = 1,183 kg/m ³
σ	Tensão superficial, N/m
φ	Constante do modelo de Prado (1986)
ψ	Definido na Equação 2.43
ψ	Fator que leva em conta o arraste de líquido em pratos <i>dualflow</i> , Equação 3.31
ψ'	Fator que leva em conta o gotejamento de líquido em pratos <i>dualflow</i> , Equação 3.33
ϕ	Fração perfurada do prato (A_H/A_A)
Φ	Fator de correção, Equação 2.140

Números adimensionais

Eo	Número de Eotvos = $Eo = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot d_{BS}}{\sigma}$
Fr_h	Número de Froude = $Fr_h = u_H \cdot \left(\frac{\rho_G}{g \cdot h_{CL} \cdot (\rho_L - \rho_G)} \right)^{0,5}$
Mo	Número de Morton = $Mo = \frac{g \cdot \mu_L^4 \cdot (\rho_L - \rho_G)}{\rho_L^2 \cdot \sigma^3}$
Pe_G	Número de Peclet = $Pe_G = \frac{d_B \cdot u_B}{D_G}$
Re_1	Número de Reynolds do <i>jet</i> = $Re_1 = \frac{d_1 \cdot u_J \cdot \rho_G}{\mu_G}$
Re	Número de Reynolds da bolha = $Re = \frac{d_B \cdot u_B \cdot \rho_L}{\mu_L}$
Re_H	Número de Reynolds do furo = $Re_H = \frac{d_H \cdot u_H \cdot \rho_G}{\mu_G}$
Sc_G	Número de Schmidt na fase gás = $Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D_G}$
Sh_∞	Número de Sherwood = $Sh_\infty = \frac{k'_G \cdot d_B}{D_G}$

APÊNDICE B - CONDIÇÕES OPERACIONAIS E DADOS GEOMÉTRICOS DAS COLUNAS REAIS

B1 - Fracionadora de propeno

Os parâmetros geométricos das bandejas da Fracionadora de propeno foram obtidos das folhas de dados e dos desenhos feitos pelos projetistas e são mostrados na Tabela B-1.

Tabela B-1: Dados geométricos dos pratos da Fracionadora de propeno

Diâmetro dos furos, d_H (mm)	9
Pitch (mm)	18,9
Área ativa do prato, A_A (m ²)	15,2053
Área perfurada do prato, A_H (m ²)	3,15447
ϕ (A_H / A_A)	0,2075
Altura do vertedouro = ondulação, h_W (mm)	6,35
Espaçamento entre pratos, T_S (mm)	400
Diâmetro do prato, d_C (mm)	4400
Comprimento da corda, L_W (mm)	4400
Tipo de prato	ondulado (<i>dualflow</i>)
Espessura, T (mm)	2,50

Os casos da Tabela B-2 e B-3 representam períodos de tempo onde as condições operacionais da coluna estavam com baixa variabilidade. Para a Fracionadora de propeno se obtiveram somente dois períodos de coleta de dados, bastante similares. Durante todo o período de coleta de dados, que foi de 1º de julho de 2002 a 1º de julho de 2004, esta coluna foi pouco modificada em suas variáveis manipuladas, devido à especificação do produto propeno ser bastante crítica para os clientes e a demanda por este produto ser bastante elevada, não havendo chances para testes da coluna com perda de especificação. Coletaram-se os dados nos dias 27 de maio de 2004 das 16 às 23 horas (Caso C) e no dia 17 de junho de 2004 das 20 às 21 horas (Caso D), quando as colunas estavam com baixa variabilidade há pelo menos 24 horas. Os dados anteriores a 27 de maio de 2004 foram descartados, pois quatro termopares da coluna estavam com indicação falsa, ou seja, descalibrados.

Tabela B-2: Condições operacionais, com balanço de massa ajustado da Fracionadora de propeno

	Caso C	Caso D
Data	27/05/2004	17/06/2004
Horário	16:00 hs à 23:00 hs	20:00 hs à 21:00 hs
Vazões (kg/h)		
Carga	23945	25000
Topo	22820	23460
Fundo	1125	1540
Refluxo	419667	419497
Relações		
Refluxo / destilado	18,390	17,881
Recuperação de propeno	99,78	99,52
Temperaturas (°C)		
Topo (prato 1)	29,01	5,09 (1)
Refluxo	37,46	37,10
Prato 140	30,23	1,50 (1)
Prato 185	32,82	32,51
Carga antes do 13P71	45,56	30,10
Carga após 13P71	33,10 (projeto)	33,10 (projeto)
Fundo (prato 224)	38,66	38,13
Retorno do refeedor	38,30 (1)	37,65 (1)
Pressões manométricas (kPa)		
Descarga do 13C04	1853,43	1852,10
Refluxo após 13P71	1745,55	1744,23
Topo	1147,30	1143,90
Carga	1274,86 (projeto)	1274,86 (projeto)
Perda de carga total	107,87 (projeto)	107,87 (projeto)
Cargas térmicas (GJ / s)		
Refeedor	2,443	2,391

(1) Estes termopares continuaram com indicação falsa, mesmo após calibração dos instrumentos realizada no dia 27 de maio de 2004.

Na Tabela B-3, para o caso D, retiraram-se simultaneamente amostras das correntes de carga, topo e fundo, às 20:00 horas do dia 17 de junho de 2004, e fez-se a identificação completa de todos os componentes destas correntes, no laboratório. Para o caso C, utilizaram-se os analisadores em linha para alguns componentes e para os demais os valores da análise do caso D.

Tabela B-3: Composição das correntes com balanço de massa ajustado para a Fracionadora de propeno

Data Horário	Caso C 27/05/2004 16:00 hs às 23:00 hs	Caso D 17/06/2004 20:00 hs às 21:00 hs
Carga (% mol)		
Etano (1)	0,0018	0,0056
Eteno (1)	0,00001	0,00001
Propano (1)	4,6410	5,8100
Propeno (1)	95,2800	94,1100
Ciclopropano (3)	0,0570	0,0570
Propadieno (3)	0,0150	0,0150
Metil-acetileno (3)	0,0065	0,0065
C4's (isobutano) (3)	0,00035	0,00035
C5's (<i>green-oil</i> = hexeno+C12) (3)	0,0029	0,0029
Total	100,0046	100,0074
Topo (% mol)		
Etano (1)	0,0061	0,0061
Eteno (1)	(4)	(4)
Propano (1)	0,4427	0,4495
Propeno (2)	99,5511	99,5444
Ciclopropano	(4)	(4)
Propadieno	(4)	(4)
Metil-acetileno	(4)	(4)
C4's (isobutano)	(4)	(4)
C5's (<i>green-oil</i> = hexeno+C12)	(4)	(4)
Total	100,0000	100,0000
Fundo (% mol)		
Etano	(4)	(4)
Eteno	(4)	(4)
Propano (2)	93,5875	90,9727
Propeno (1)	5,0114	7,6262
Ciclopropano (3)	0,9852	0,9852
Propadieno (3)	0,2513	0,2513
Metil-acetileno (3)	0,1094	0,1094
C4's (isobutano) (3)	0,0059	0,0059
C5's (<i>green-oil</i> = hexeno+C12) (3)	0,0493	0,0493
Total	100,0000	100,0000

(1) Analisadores em linha.

(2) Calculado: 100 % - outros componentes.

(3) No dia 17/06/2004 às 20:00 horas (Caso D) foi realizada análise completa em laboratório dos componentes que não aparecem no analisador em linha. Estes valores foram repetidos para o caso C. Para o caso D, prevaleceu a análise de laboratório sobre os analisadores em linha, devido à confiabilidade, para os componentes analisados por ambos.

(4) Componente não analisado.

B2 - Fracionadora de buteno-1

Os parâmetros geométricos das bandejas da Fracionadora de buteno-1 foram obtidos

das folhas de dados e dos desenhos feitos pelos projetistas e são mostrados na Tabela B-4.

Tabela B-4: Dados geométricos dos pratos da Fracionadora de buteno-1

Diâmetro dos furos, d_H (mm)	6
Pitch (mm)	13
Área ativa do prato, A_A (m ²)	5,067
Área perfurada do prato, A_H (m ²)	0,9784
ϕ (A_H/A_A)	0,1931
Altura do vertedouro = ondulação, h_W (mm)	6,35
Espaçamento entre pratos, T_S (mm)	400
Diâmetro do prato, d_C (mm)	2540
Comprimento da corda, L_W (mm)	2540
Tipo de prato	ondulado (<i>dualflow</i>)
Espessura, T (mm)	2,50

Ao contrário da Fracionadora de propeno, para a Fracionadora de buteno-1 se obtiveram quatro períodos de coleta de dados, com condições operacionais muito diferentes. Os períodos coletados com as condições operacionais e composições das correntes são mostrados nas Tabelas B-5 e B-6. As diferentes condições operacionais obtidas tornaram o estudo desta coluna bastante enriquecedor. Inclusive se conseguiu a realização de teste na coluna nas condições de projeto, com a perda de especificação do produto de topo buteno-1, mostrado no Caso R. Os Casos P e Q representam as condições normais de operação desta coluna e o caso H uma condição de operação no limite inferior de vazões, com o produto de topo ainda especificado. Estão disponíveis os dados desde 1º de Abril de 2000 até 30 de junho de 2004.

Tabela B-5: Condições operacionais com balanço de massa ajustado da Fracionadora de buteno-1

Data / Horário	Caso H 05/03/2002 às 20:00 hs à 08/03/2002 às 6 hs	Caso P 23/09/2003 às 00:00 hs à 25/09/2003 às 7:00 hs	Caso Q 17/06/2004 9:00 hs à 11:00 hs	Caso R 25/06/2004 7:00 hs à 8:36 hs
Vazões (kg/h)				
Carga	13277	17385	15835	12854
Topo	3578	5512	5252	1856
Fundo	9500	11667	10383	10998
Gás combustível	198	206	201	0
Refluxo	104687	110676	117356	81986
Relações				
Refluxo / (destilado + GC)	27,72	19,36	21,52	44,17
Recuperação de buteno-1	67,21	71,22	76,29	29,83
Temperaturas (°C)				
Vaso de topo	54,98	53,50	57,68	41,89
Topo (prato 1)	59,12	60,47	62,80	61,84
Prato 40	61,14	62,73	65,08	64,39
Prato 80	63,16	64,89	67,52	65,43
Prato 89	65,67	66,90	69,55	67,58
Fundo (prato 140)	69,24	70,15	72,74	69,94
Carga	35,00 (proj.)	35,00 (proj.)	35,00 (proj.)	35,00 (proj.)
Pressões manométricas (kPa)				
Vaso de topo	595,36	612,92	663,78	676,93
Topo (prato 1)	666,65	676,35	725,12	721,75
Fundo (prato 140)	699,72	735,57	785,31	764,88
Perda de carga na coluna	33,07	59,22	60,19	43,13
Carga	875,73 (proj.)	875,73 (proj.)	875,73 (proj.)	875,73 (proj.)
Cargas térmicas (GJ / s)				
Refervedor	0,646	0,685	0,700	0,519

Na Tabela B-6, para os casos Q e R, fez-se análise completa em laboratório das correntes de carga, topo, fundo e gás combustível nos dias 17 de junho de 2004 às 10:00 horas e 25 de junho de 2004 às 9:00 horas, respectivamente. Para os casos H e P, utilizaram-se as análises de rotina, também completas para a maioria dos componentes, e a análise do caso Q para a corrente de gás combustível.

Tabela B-6: Composição das correntes com balanço de massa ajustado da Fracionadora de buteno-1

Data / Horário	Caso H 05/03/2002 às 20:00 hs à 08/03/2002 às 6 hs	Caso P 23/09/2003 às 00:00 hs à 25/09/2003 às 7:00 hs	Caso Q 17/06/2004 9:00 hs à 11:00 hs	Caso R 25/06/2004 7:00 hs à 8:36 hs
Carga (% mol)				
Hidrogênio (1)	0,0025	0,0890	0,0700	0,0500
C3's (propano) (1)	0,1343	0,0350	0,0300	0,0100
1,3-butadieno	0,0021	0,0010	0,0017	0,0018
Isobutano (2)	1,6686	2,1000	2,3500	1,8500
Isobuteno (2)	0,1314	0,1540	0,1100	0,1300
Buteno-1 (2)	39,2900	42,7000	41,5000	42,0300
n-butano (2)	8,7500	11,0080	11,1000	11,7300
Cis-2-buteno (2)	12,7443	10,9900	10,8700	10,9200
Trans-2-buteno (2)	37,0343	32,5900	33,5000	32,8300
Ciclobutano	0,0843	0,1857	0,2900	0,2700
C5's (isopentano)	0,0847	0,0560	0,0510	0,0800
MTBE	0,0000	0,0188	0,0080	0,0080
DME	0,0700	0,0753	0,0850	0,0850
Metanol	0,0015	0,0009	0,0030	0,0030
Água	0,0040 (= R)	0,0040 (= R)	0,0350	0,0040
Total	100,0019	100,0077	100,0037	100,0018
Topo (% mol)				
Hidrogênio	0,0557 (= Q)	0,0557 (= Q)	0,0557	0,2700
C3's (propano)	0,4450	0,0850	0,1500	0,0700
1,3-butadieno	0,0035	0,0022	0,0037	0,0040
Isobutano	5,1250	5,8433	6,3500	11,2600
Isobuteno	0,3500	0,3800	0,2600	0,3900
Buteno-1	93,4900	93,2500	92,4000	87,0100
n-butano	0,3250	0,4283	0,4000	0,2900
Cis-2-buteno	0,0000	0,0008	0,0000	0,0000
Trans-2-buteno	0,0100	0,0000	0,0600	0,3200
Ciclobutano			0,0000	0,0010
C5's (isopentano)			0,0000	0,0031
MTBE			0,0000	0,0000
DME	0,2345 (=Q)	0,2345 (=Q)	0,2345	0,6000
Metanol			0,0006	0,0000
Água			0,0320	0,0200
Total	99,9830	100,2799	99,9465	100,2381
Fundo (% mol)				
Hidrogênio	-	-	-	-
C3's (propano)	-	-	-	-
1,3-butadieno	0,0007	0,0005	0,0000	0,0014
Isobutano	0,0200	0,4183	0,1300	0,4100
Isobuteno	0,0250	0,0467	0,0200	0,0800
Buteno-1	18,5950	21,8783	17,1400	31,5400
n-butano	13,3100	15,3467	15,7600	14,8600

Cis-2-buteno	16,9150	14,8100	15,7400	12,2900
Trans-2-buteno	50,8350	47,1083	50,8700	39,0700
Ciclobutano	0,1200	0,1867	0,2400	0,2600
C5's (isopentano)	0,1750	0,1556	0,0782	0,0800
MTBE	0,0000	0,0309	0,0141	
DME	-	-	-	-
Metanol	0,0000	0,0006	0,0000	
Água	-	-	-	-
Total	99,9957	99,9826	99,9923	98,5914
Gás combustível (% mol) (3)				
Hidrogênio	7,5900	7,5900	7,5900	-
C3's (propano)	0,7700	0,7700	0,7700	-
1,3-butadieno	0,0037	0,0037	0,0037	-
Isobutano	14,3900	14,3900	14,3900	-
Isobuteno	0,2700	0,2700	0,2700	-
Buteno-1	75,1400	75,1400	75,1400	-
n-butano	0,9900	0,9900	0,9900	-
Cis-2-buteno	0,0000	0,0000	0,0000	-
Trans-2-buteno	0,2900	0,2900	0,2900	-
Ciclobutano	0,0000	0,0000	0,0000	-
C5's (isopentano)	0,0000	0,0000	0,0000	-
MTBE	0,0000	0,0000	0,0000	-
DME	0,5363	0,5363	0,5363	-
Metanol	0,0018	0,0018	0,0018	-
Água	0,0110	0,0110	0,0110	-
Total	99,9928	99,9928	99,9928	-

(1) Teor de H₂ ajustado na carga para atingir a temperatura do vaso de topo da coluna e vazão de gás combustível.

(2) O balanço de massa por componente foi ajustado somente para estes seis principais componentes. Para os demais componentes considerou-se confiável somente o valor analisado na corrente de carga.

(3) No dia 17/06/2004 às 10 hs (Caso Q) foi realizada análise completa de laboratório da composição do gás combustível. Estes valores foram repetidos nos outros casos.

B3 - Fracionadora de C6

Os parâmetros geométricos das bandejas da Fracionadora de C6 foram obtidos das folhas de dados e dos desenhos feitos pelos projetistas e são mostrados na Tabela B-7.

Tabela B-7: Dados geométricos dos pratos da Fracionadora de C6

Diâmetro dos furos, d_H (mm)	40
Número de furos	301
Pitch (mm)	86,2
Área ativa do prato, A_A (m ²)	2,2540
Área perfurada do prato, A_H (m ²)	0,3782
ϕ (A_H / A_A)	0,1678
Área total, A_T (m ²)	2,6880
Área do <i>downcomer</i> , A_D (m ²)	0,217
A_D / A_T	0,0807
Comprimento do caminho do líquido, FPL (mm)	1350
Abertura sob o <i>downcomer</i> (mm)	32
Altura do vertedouro, h_W (mm)	52
Espaçamento entre pratos, T_S (mm)	500
Diâmetro do prato, d_C (mm)	1850
Comprimento da corda, L_W (mm)	1264
Tipo de prato	V-1 Sulzer
Espessura, T (mm)	2,50

Obtiveram-se cinco períodos de coleta de dados, com condições operacionais bem distintas entre si. Os períodos coletados, com as condições operacionais e composições das correntes, são mostrados nas Tabelas B-8 e B-9. Novamente, como na Fracionadora de buteno-1, as condições operacionais obtidas são bem diferentes umas das outras, devido à especificação do produto de topo ser mais flexível quanto ao teor de tolueno e devido a este teor ser menos sensível às variações de vazões de carga e refluxo. O período investigado foi de 1º de maio de 2000 a 1º de agosto de 2004. O caso B representa o período de tempo onde a coluna operou com carga máxima e o caso L, com carga mínima. No caso J, fez-se a análise completa em laboratório das correntes de carga, topo e fundo, no mesmo horário. Os casos K e M são condições normais de operação da coluna, onde as vazões estavam com baixa variabilidade.

Tabela B-8: Condições operacionais da Fracionadora de C6 com balanço de massa ajustado

Data / Horário	Caso B	Caso J	Caso K	Caso L	Caso M
	04/02/2001 às 00:00 hs à 09/02/2001 às 00:00 hs	09/07/2004 10:12 hs à 12:36 hs	18/02/2004 às 06:00 hs à 19/02/2004 às 16:00 hs	27/01/2004 às 00:00 hs à 30/01/2004 às 00:00 hs	12/10/2003 às 11:00 hs à 15/10/2003 às 00:00 hs
Vazões (kg/h)					
Carga	28813	24702	25001	20954	26500
Topo (1)	17624	14262	14425	12595	15044
Fundo	11191	10460	10577	8361	11457
Refluxo	19030	15188	14849	14068	14306
Relações					
Refluxo / destilado	1,080	1,065	1,029	1,117	0,951
Temperaturas (°C)					
Vaso de topo	61,71	59,25	60,25	60,15	56,69
Topo (prato 1)	83,75	85,88	85,61	85,58	85,50
Prato 8	87,43	88,49	88,15	88,08	88,19
Prato 30	107,72	101,78	101,72	100,35	102,17
Prato 54	113,92	113,02	112,30	114,37	113,00
Fundo (prato 60)	138,61	139,04	137,10	137,04	138,58
Retorno do refervedor	139,04	140,41	138,70	138,69	139,95
Carga	123,06	126,97	129,97	129,32	125,91
Pressões manométricas (kPa)					
Topo (prato 1)	24,52	28,84	26,95	27,78	26,35
Fundo (prato 60)	69,59	61,62	60,67	58,16	59,06
Perda de carga na coluna	45,07	32,79	33,72	30,39	32,71
Carga	294,20	294,20	294,20	294,20	
Cargas térmicas (GJ / s)					
Refervedor	0,244	0,208	0,202	0,185	0,200

(1) Ajustou-se a vazão de destilado em cada caso buscando a especificação do teor de benzeno no fundo da coluna e a eficiência de Murphree global visando à especificação do tolueno no topo da coluna.

Na Tabela B-9, somente para o caso J fez-se análise completa das correntes de carga, topo e fundo, no dia 9 de julho de 2004 às 12:00 horas. Para os demais casos, utilizaram-se as análises de rotina de laboratório já existentes. Devido à diversidade de componentes nas correntes desta coluna, eles foram agrupados conforme o número de carbonos e o grupo funcional.

Tabela B-9: Composição das correntes da Fracionadora de C6 com balanço de massa ajustado

Data / Horário	Caso B 04/02/2001 às 00:00 hs à 09/02/2001 às 00:00 hs	Caso J (2) 09/07/2004 10:12 hs à 12:36 hs	Caso K 18/02/2004 às 06:00 hs à 19/02/2004 às 16:00 hs	Caso L 27/01/2004 às 00:00 hs à 30/01/2004 às 00:00 hs	Caso M 12/10/2003 às 11:00 hs à 15/10/2003 às 00:00 hs
Carga (% massa)					
Nitrogênio (1)	0,0105	0,0125	0,012	0,012	0,013
C5's (ciclopentano)	0,803	0,0500	0,078	0,098	0,218
n-hexano	2,700	2,0000	1,540	1,914	2,703
Metil-ciclopentano	8,280	6,0200	5,851	5,921	5,959
Benzeno	48,805	48,6300	49,600	51,223	46,960
n-heptano	0,400	0,6200	0,408	0,430	0,613
Metil-ciclohexano	1,800	2,2700	1,523	1,745	2,104
Tolueno	20,585	22,7000	23,830	23,170	22,685
C8 não aro (n-propil-ciclopentano)	0,880	0,8500	0,900	0,918	1,004
Orto-xileno	1,000	1,5300	1,431	1,227	1,557
Meta-xileno	2,600	3,1000	3,070	2,056	3,007
Para-xileno	0,800	1,0500	0,900	0,600	0,600
Etil-benzeno	8,348	9,0000	9,233	8,661	9,069
C9 não aro (4-etil-heptano)	0,760	0,4700	0,793	1,037	2,100
C9 aro (meta-etil-tolueno)	1,563	1,0100	0,676	0,820	1,045
C10's (1,3-dimetil-4-etilbenzeno)	0,350	0,3500	0,100	0,100	0,200
C11's + (n-undecano)	0,310	0,3100	0,050	0,050	0,150
Água	0,0033	0,0033	0,0033	0,0033	0,0033
Total	100,0063	99,9833	100,0000	99,9940	99,9983
Topo (% massa)					
Nitrogênio					
C5's (ciclopentano)		0,0800			
n-hexano		3,4300			
Metil-ciclopentano	20,949	10,6500	14,868	15,263	18,028
Benzeno	79,043	83,1000	85,130	84,726	81,969
n-heptano		0,8600			
Metil-ciclohexano		1,8500			
Tolueno	0,0030	0,0010	0,0021	0,0005	0,0045
C8 não aro (n-propil-ciclopentano)		0,0300			
Orto-xileno					
Meta-xileno					
Para-xileno					
Etil-benzeno					
C9 não aro (4-etil-heptano)					

C9 aro (meta-etil-tolueno)					
C10's (1,3-dimetil-4-etilbenzeno)					
C11's + (n-undecano)					
Água					
Total	99,9957	100,0010	99,9996	99,9894	100,0007
Fundo (% massa)					
Nitrogênio					
C5's (ciclopentano)					
n-hexano					
Metil-ciclopentano					
Benzeno	1,141	0,9600	1,005	0,437	1,187
n-heptano		0,3000			
Metil-ciclohexano		2,7900			
Tolueno	53,030	53,2900	56,005	57,183	53,060
C8 não aro (n-propil-ciclopentano)	6,083	2,0000	4,250	4,780	4,997
Orto-xileno		3,6400			
Meta-xileno		7,2900			
Para-xileno		2,4500			
Etil-benzeno	34,281	21,1400	34,635	32,920	34,393
C9 não aro (4-etil-heptano)	2,295	1,1100	1,720	2,047	2,220
C9 aro (meta-etil-tolueno)	3,169	2,4000	2,385	2,633	4,143
C10's (1,3-dimetil-4-etilbenzene)		0,8342			
C11's + (n-undecano)		0,7200			
Água					
Total	99,9997	98,9242	100,0000	100,0000	100,0000

(1) Teor de N₂ ajustado na carga para atingir a temperatura do vaso de topo da coluna.

(2) No dia 09/07/2004 às 12:00 hs (Caso J) foi realizada análise completa em laboratório da composição da carga, topo e fundo da coluna. Nos demais casos foram realizadas análises completas apenas da carga da coluna.

APÊNDICE C - ESTADOS ESTACIONÁRIOS

C1 – Fracionadora de propeno

		CARGA	FUNDO TOTAL T10	FUNDO P/A05	FUNDO P/ESFERA	REFLUXO	TOPO P/ESFERAS	PRESSÃO TOPO
Caso Estatística Período		13FC601.pv	13FC611A.pv	13FC608.pv	13FI610.AO	13FC614.pv	13FI617.AO	13PC622.pv
27/5/04 17:00 a								
C	media 1 hora	23,9447	0,8154	0,8331	0,8153	419,6667	12,9685	11,6992
	desvio	0,0051	0,0226	0,0071	0,0226	0,2194	0,2012	0,0040
	variância	0,0000	0,0005	0,0001	0,0005	0,0482	0,0405	0,0000
17/6/04 das								
D	média 1 min	24,9986	1,1659	0,8233	1,1658	419,4970	2,9005	11,6646
	desvio	0,3216	0,0626	0,0095	0,0627	1,3218	0,8953	0,0044
	variância	0,1034	0,0039	0,0001	0,0039	1,7471	0,8015	0,0000

		TOPO	REFLUXO	TOPO P/ COLIGADAS	FUNDO PROPENO	TOPO ETANO	TOPO PROPANO	TOPO ETANO	TOPO ETENO	PROPANO TOPO
27/5/04 17:00 a		13TI643.AO	13TI631.AO	13FC616.pv	13AI606A.AO	13AI607B.AO	13AI607C.AC	13AI608A	13AI608B	13AI608C.AC
C	media 1 hora	29,0058	37,4592	10,0014	5,0114	52,6091	0,4427	53,9637	0,0912	0,4365
	desvio	0,6662	0,2740	0,0125	0,1889	1,8394	0,0039	2,2282	0,0207	0,0048
	variância	0,4438	0,0750	0,0002	0,0357	3,3835	0,0000	4,9648	0,0004	0,0000
17/6/04 das 20:01										
D	média 1 min	5,0867	37,1009	20,0045	7,6262	60,6610	0,4495	65,1727	0,1000	0,4417
	desvio	3,3582	1,0430	0,2857	0,0675	1,7228	0,0022	0,6482	0,0000	0,0075
	variância	11,2776	1,0878	0,0816	0,0046	2,9679	0,0000	0,4202	0,0000	0,0001

		ETANO CARGA	ETENO CARGA	PROPANO CARGA	PROPENO CARGA	CARGA A05	T PRATO 140	T PRATO 185	T CARGA	T FUNDO
27/5/04 17:00 a		13AR12B1.AO	13AR12B2.AO	13AR12B3.AO	13AR12B4.AC	05FI09.PV	13TI616.AO	13TI617.AC	13TI632.AO	13TI635.AO
C	media 1 hora	18,8027	47,0840	4,6410	95,3503	828,0242	30,2333	32,8213	45,5594	38,6638
	desvio	22,9822	16,8406	0,0215	0,0212	0,0580	0,2699	0,2377	3,7474	0,2306
	variância	528,1814	283,6042	0,0005	0,0005	0,0034	0,0728	0,0565	14,0434	0,0532
17/6/04 das 20:01										
D	média 1 min	0,0000	40,5172	5,1345	94,8606	916,0523	1,5012	32,5144	30,1003	38,1334
	desvio	0,0000	48,7954	0,0447	0,0466	1,2659	1,7999	1,6272	19,5038	0,6469
	variância	0,0000	2380,9909	0,0020	0,0022	1,6026	3,2395	2,6479	380,3976	0,4184

		PROPENO COLIGADA	PRESSÃO DESC 13C04	VAZÃO TOTAL TOPO	VAZÃO TOTAL FUNDO	TOPO PROPENO	FUNDO PROPANO
27/5/04 17:00 a		13fc616.PV	13PI612.AO	616+617	610+05FI09	outros contam. = 1,4%mol	
C	media 1 hora	10,0014	18,8997	22,9700	1,6434	99,5573	93,5886
	desvio	0,0125	0,0040	0,2058	0,0225	0,0039	0,1889
	variância	0,0002	0,0000	0,0423	0,0005	0,0000	0,0357
17/6/04 das 20:01							
D	média 1 min	20,0045	18,8862	22,9050	2,0818	99,5505	90,9738
	desvio	0,2857	0,0513	0,9376	0,0627	0,0022	0,0675
	variância	0,0816	0,0026	0,8790	0,0039	0,0000	0,0046

C2 – Fracionadora de buteno-1

Caso Estatística	Período	T01 CARGA BUTENO-1	T01 CARGA C4 LEVES	T01 CARGA C4 PESADOS	T01 CARGA ISOBUTENO	T01 TOPO BUTENO-1	T01 TOPO C4 LEVES	T01 TOPO C4 PESADOS	T01 TOPO N-BUTANO	T01 FUNDO BUTENO-1	T01 FUNDO C4 PESADOS	T03 TOPO BUTENO-1	T03 TOPO C4 LEVES
		%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
	25/6/2004	04A101A6.PV	04A101A8.PV	04A101A9.PV	04A101A7.PV	04A101B6.PV	04A101B8.PV	04A101B9.PV	04A101B3.PV	04A103A4.PV	04A103A6.PV	04A103B3.PV	04A103B5.PV
R	MÉDIA 12 min	44,4218	2,9056	49,4774	0,0132	83,3396	16,2475	0,1500	0,1500	35,3851	64,0141	70,8500	31,4600
	DESVIO PADRÃO	0,1193	0,0167	0,1078	0,0046	0,0572	0,1241	0,0000	0,0000	0,1228	0,1225	0,0000	0,0000
Q	MÉDIA 12 min	43,7872	2,2644	51,0605	0,0000	93,1432	6,7662	0,5005	0,4790	14,0698	84,8611	33,3305	66,2554
	DESVIO PADRÃO	0,0768	0,0090	0,0957	0,0000	0,0575	0,0311	0,0203	0,0114	0,1634	0,0838	0,0207	0,0314
P	média 1 hora	46,7423	2,2062	50,4229	0,0805	92,2127	6,9107	0,6409	0,5693	18,2196	80,0902	40,6213	57,3267
	DESVIO 1 hora	0,5467	0,0456	0,3267	0,0138	0,6956	0,1343	0,0219	0,0159	0,2376	0,2219	1,1065	0,9658
	variância	0,2989	0,0021	0,1067	0,0002	0,4839	0,0180	0,0005	0,0003	0,0564	0,0492	1,2243	0,9327
H	MÉDIA 1 hora	36,2071	1,6358	52,7521	0,0213	94,5639	5,2259	0,4056	0,3689	15,1201	47,8780	59,1322	39,2907
	DESVIO 1 hora	1,0662	0,2016	4,8313	0,0214	0,4330	0,4723	0,0491	0,0446	1,5726	18,5307	2,4631	1,6752
	variância	1,1369	0,0407	23,3413	0,0005	1,1875	0,2231	0,0024	0,0020	2,4732	343,3876	6,0666	2,8064

Caso Estatística	Período	T02 FUNDO BUTENO-1	T02 FUNDO C4 LEVES	T02 FUNDO C4 PESADOS	T02 FUNDO ISOBUTENO	T02 FUNDO ISOBUTANO	C4 PV01	CARGA P/T01	CARGA P/T03	C4 PESADO PRODUTO	REFLUXO T01	VB P/P02
		%	PPM	PPM	PPM	PPM	T/H	T/H	T/H	T/H	T/H	T/H
	25/6/2004	04A103C2.PV	04A103C4.PV	04A103C5.PV	04A103C3.PV	04A103C7.PV	04F101.PV	04F102.PV	04F105.PV	04F113.PV	04F104.PV	04F103.PV
R	MÉDIA 12 min	98,8900	95,0000	3984,0000	0,0000	94,6000	12,7917	12,9498	1,8670	10,9981	81,9862	14,3085
	DESVIO PADRÃO	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0429	0,0358	0,0469	0,0151	0,0387	0,1073
Q	MÉDIA 12 min	99,1019	3755,1320	5079,3390	3634,7513	119,7906	15,8929	15,9650	5,2231	10,3829	117,3564	19,3003
	DESVIO PADRÃO	0,0040	48,8162	88,7794	40,5291	8,6872	0,1464	0,1142	0,0870	0,0082	0,1318	0,1654
P	média 1 hora	98,9570	3661,9667	6618,9792	3627,5021	32,1471	17,4023	17,5004	5,4511	11,6542	110,6759	18,8838
	DESVIO 1 hora	0,0356	62,4919	382,5049	62,7541	4,2828	0,0273	0,0078	0,0859	0,0223	0,1176	0,0791
	variância	0,0013	3905,2355	146309,9693	3938,0806	18,3421	0,0007	0,0001	0,0074	0,0005	0,0138	0,0063
H	MÉDIA 1 hora	99,6683	3023,4236	656,3518	2684,1698	333,7245	13,2675	13,5003	3,6252	9,5001	104,6875	17,7920
	DESVIO 1 hora	0,0170	144,0235	152,6239	122,8134	47,7181	0,0162	0,0060	0,0434	0,0007	0,1341	0,0938
	variância	0,0003	20742,7707	23294,0553	15083,1296	2277,0202	0,0003	0,0000	0,0019	0,0000	0,0180	0,0088

Caso Estatística	Período	PRESSAO TOPO T01	PRESSAO V02	PRESSAO TOPO T01	PRESSAO FUNDO T01	TEMPERATURA V02	TEMPERATURA TOPO T01	TEMPERATURA PRATO 40 T01	TEMPERATURA PRATO 80 T01	TEMPERATURA PRATO 89 T01	TEMPERATURA FUNDO T01	GC TOPO T01
		KGf/CM2	KGf/CM2	KGf/CM2	KGf/CM2	C	C	C	C	C	C	T/H
	25/6/2004 07:12:00 a 8:36	04P104.PV	04P105.PV	04P1100.PV	04P1101.PV	04T107.PV	04T106.PV	04T105.PV	04T104.PV	04T103.PV	04T102.PV	04F120.PV
R	MÉDIA 12 min	7,2190	6,9027	7,3598	7,7996	41,8865	61,8418	64,3920	65,4345	67,5771	69,9399	0,1365
	DESVIO PADRÃO	0,0370	0,0376	0,0365	0,0365	0,1707	0,1792	0,1827	0,1851	0,1939	0,2108	0,0016
Q	MÉDIA 12 min	7,2040	6,7687	7,3942	8,0079	57,6780	62,7982	65,0834	67,5160	69,5549	72,7448	0,2006
	DESVIO PADRÃO	0,0549	0,0541	0,0532	0,0493	0,3389	0,2382	0,2191	0,2050	0,2152	0,1240	0,0031
P	média 1 hora	6,7129	6,3030	6,8969	7,5008	52,9947	60,4742	62,7281	64,8904	66,9049	70,1519	0,2056
	DESVIO 1 hora	0,0940	0,0959	0,0918	0,0902	0,5444	0,4547	0,4549	0,4586	0,4559	0,4471	0,0092
	variância	0,0088	0,0092	0,0084	0,0081	0,2964	0,2067	0,2069	0,2103	0,2078	0,1999	0,0001
H	MÉDIA 1 hora	6,4165	6,0469	6,7979	7,1351	54,9811	59,1246	61,1440	63,1614	65,6726	69,2419	0,1984
	DESVIO 1 hora	0,1655	0,1649	0,1714	0,1569	0,9834	0,8226	0,8102	0,8831	0,9046	0,9056	0,0047
	variância	0,0274	0,0272	0,0294	0,0246	0,9671	0,6767	0,6564	0,7798	0,8184	0,8201	0,0000

C3 – Fracionadora de C6

Caso Estatística	Período	CARGA	TOPO	FUNDO	REFLUXO	VAPOR REFERV.	CARGA P/V01	ENTRADA DO REFERV.	FUNDO	RETORNO DO REFERV.
		122f02.pv	122f10.pv	122f04.pv	122f06.pv	122f05.pv	122f01.pv	122ti12.pv	122ti13.pv	122ti14.pv
B	media 1 dia	28,8128	13,3769	10,9106	19,0300	6,9833	28,4994	138,6071	139,9114	139,0384
	desvio	0,2444	0,1607	0,3918	0,0505	0,0539	0,2582	0,5438	0,4197	0,5073
	variância	0,0597	0,0258	0,1535	0,0026	0,0029	0,0667	0,2957	0,1761	0,2573
J	MÉDIA 12 min	24,7019	14,2001	10,6374	15,1877	5,9741	23,6950	138,3951	139,0372	140,4086
	desvio	0,0046	0,0031	0,0352	0,0089	0,1018	0,0374	0,0630	0,1018	0,0727
	variância	0,0000	0,0000	0,0012	0,0001	0,0104	0,0014	0,0040	0,0104	0,0053
K	média 1 hora	25,0008	14,4002	10,6458	14,8489	5,7784	24,0556	136,4911	137,1035	138,7035
	desvio	0,0032	0,0009	0,0572	0,0352	0,1634	0,0422	0,1140	0,1107	0,0941
	variância	0,0000	0,0000	0,0033	0,0012	0,0267	0,0018	0,0130	0,0123	0,0089
L	média 1 hora	20,9544	12,4510	8,5731	14,0680	5,2929	19,6780	136,3769	137,0378	138,6901
	desvio	0,1390	0,0707	0,1284	0,0640	0,0718	0,1527	0,2616	0,2512	0,1982
	variância	0,0193	0,0050	0,0165	0,0041	0,0052	0,0233	0,0684	0,0631	0,0393
M	média 1 hora	26,5002	15,1929	11,5093	14,3058	5,7211	25,7699	138,1393	138,5755	139,9514
	desvio	0,0028	0,0471	0,1121	0,0528	0,2742	0,0510	0,1940	0,2078	0,1709
	variância	0,0000	0,0022	0,0126	0,0028	0,0752	0,0026	0,0376	0,0432	0,0292

		PRATO 54	PRATO 30	PRATO 8	TOPO	SAÍDA DO AR DO COND.	SAÍDA DO COND.	VASO DE TOPO	PRESSÃO TOPO	PRESSÃO FUNDO	T carga
		122ti10.pv	122ti09.pv	122ti08.pv	122ti07.pv	122ti17.pv	122ti15.pv	122ti16.pv	122pi03.pv	122pi04.pv	122TI05.pv
	5/2/01 1hs a 9/2/01										
B	média 1dia 1hs	113,9197	107,7211	87,4273	83,7473	55,4886	61,4842	61,7139	0,2500	0,7096	123,0632
	desvio	1,5828	2,2854	0,1245	0,1213	0,7467	0,8910	0,8753	0,0000	0,0067	0,5318
	variância	2,5051	5,2230	0,0155	0,0147	0,5576	0,7940	0,7662	0,0000	0,0000	0,2828
	9/7/04 das 10:24 hs										
J	MÉDIA 12 min as 12:36 hs	113,0203	101,7856	88,4926	85,8833	51,6058	59,1405	59,2541	0,2940	0,6284	126,9726
	desvio	0,1906	0,0407	0,0430	0,0377	0,0967	0,0940	0,0815	0,0000	0,0054	0,2686
	variância	0,0363	0,0017	0,0018	0,0014	0,0094	0,0088	0,0066	0,0000	0,0000	0,0722
	18/2/04 7 hs a										
K	média 1 hora 19/2/04 16:00 hs	112,3019	101,7215	88,1464	85,6117	53,7417	60,0570	60,2522	0,2748	0,6186	129,9743
	desvio	0,3030	0,0470	0,0464	0,0472	0,9966	0,8587	0,8474	0,0011	0,0108	0,8735
	variância	0,0918	0,0022	0,0021	0,0022	0,9932	0,7374	0,7180	0,0000	0,0001	0,7629
	27/1/04 1hs a										
L	média 1 hora 30/1/04 00:00hs	114,3700	100,3497	88,0770	85,5813	53,3122	59,9711	60,1491	0,2832	0,5931	129,3164
	desvio	0,1369	0,2976	0,3095	0,4303	0,9627	0,9387	0,9284	0,0048	0,0105	1,5036
	variância	0,0187	0,0886	0,0958	0,1852	0,9268	0,8811	0,8619	0,0000	0,0001	2,2609
	12/10/03 12hs a										
M	média 1 hora 15/10/03 00:00 hs	112,9997	102,1666	88,1887	85,4961	49,2278	56,5298	56,6894	0,2687	0,6023	125,9084
	desvio	0,4745	0,1194	0,0717	0,0913	0,1934	0,1698	0,1756	0,0028	0,0028	0,7549
	variância	0,2251	0,0143	0,0051	0,0083	0,0374	0,0288	0,0308	0,0000	0,0000	0,5699

APÊNDICE D – PROGRAMA EM FORTRAN

A seguir são mostradas duas rotinas de programação em Fortran 77, uma para a coluna de pratos valvulados com *dowcomer* (Fracionadora de C6) e a outra para as colunas de pratos *dualflow* (Fracionadora de buteno-1 e Fracionadora de propeno). Estas rotinas foram inseridas no simulador Aspen Plus 12.1, no bloco *flowsheeting options – calculator*, tendo como entradas as propriedades geométricas dos pratos, vazões internas de líquido e vapor e as propriedades físicas dos componentes obtidos de cada prato automaticamente e como saídas as composições de topo e fundo da coluna, perfis de temperatura e de eficiência de prato de Murphree. Para que a eficiência de prato de Murphree de cada prato seja calculada de forma iterativa pela rotina Fortran 77 deve-se entrar no bloco *convergence – conv options*, acionar *tear calculator write variables* e também selecionar a tolerância admitida, no caso 0,0001. Segundo a Aspen Technology Inc. (2000) a tolerância em uma iteração k é definida como:

$$-Tol \leq \frac{X_{k+1} - X_k}{X_k} \leq Tol \quad (G.1)$$

Seleciona-se dentro da rotina em Fortran 77 o modelo de eficiência a ser utilizado, as opções são *Ewl* para Garcia (1999) modificado e *EOGXul* para Xu et al. (1994), para pratos *dualflow*; *Emva* para Garcia (1999) modificado e *Emval* para Chan e Fair (1984), no caso de pratos valvulados. Os dados geométricos dos pratos são inseridos nas primeiras linhas da rotina em Fortran 77. As condições operacionais das colunas são inseridas normalmente no bloco *RadFrac*.

D1 – Fracionadora de propeno

```

QL      Block-Vec Block=13T10 Variable=L-VOLFLOW Sentence=HYDRAULIC
QG      Block-Vec Block=13T10 Variable=V-VOLFLOW Sentence=HYDRAULIC
ML      Block-Vec Block=13T10 Variable=L-MASSFLOW Sentence=HYDRAULIC
MG      Block-Vec Block=13T10 Variable=V-MASSFLOW Sentence=HYDRAULIC
RHOL    Block-Vec Block=13T10 Variable=RHOL Sentence=HYDRAULIC
RHOG    Block-Vec Block=13T10 Variable=RHOV Sentence=HYDRAULIC
SIGMA   Block-Vec Block=13T10 Variable=SIGMA Sentence=HYDRAULIC
MWL     Block-Vec Block=13T10 Variable=AVMWL Sentence=HYDRAULIC
MWG     Block-Vec Block=13T10 Variable=AVMWV Sentence=HYDRAULIC
MIL     Block-Vec Block=13T10 Variable=MUL Sentence=HYDRAULIC
MIG     Block-Vec Block=13T10 Variable=MUV Sentence=HYDRAULIC
X       Block-Vec Block=13T10 Variable=X Sentence=COMPS
Y       Block-Vec Block=13T10 Variable=Y Sentence=COMPS

```

C INÍCIO

```

NP = 224
NF = 140
T = 0.0025
DH = 0.009
D = 4.4
AH = 3.15447
DL= 1.30E-8
TS = 0.400
lW = 4.4
hW = 0.00635
DG = 4.64E-7

```

C ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA)
AA = ((3.1416*D**2)/4)

C FRAÇÃO DE ÁREA PERFURADA DO PRATO
FI = AH/AA

C Numero de componentes
iC = 9

C Indice dos componentes chave leve (iL) e pesado (iH)
iL = 4
iH = 3

C Composicao da mistura pseudo-binaria
Ylk(1)=Y(iL)/(Y(iL)+Y(iH))
Xlk(1)=X(iL)/(X(iL)+X(iH))

```

SUM = 0.0
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
SUM4 = 0.0
SUM5 = 0.0
SUM6 = 0.0
SUM7 = 0.0
SUM8 = 0.0
SUM9 = 0.0
SUM10 = 0.0

```

DO I = 2 , NP

C Inclinação da curva de equilibrio
Ylk(i)=Y(iL+(i-1)*iC)/(Y(iL+(i-1)*iC)+Y(iH+(i-1)*iC))
Xlk(i)=X(iL+(i-1)*iC)/(X(iL+(i-1)*iC)+X(iH+(i-1)*iC))
m(i) = (Ylk(i)-Ylk(i-1))/(Xlk(i)-Xlk(i-1))

C Fator de esgotamento
lamb(i) = m(i)*((MG(I)/MWG(I))/(ML(I)/MWL(I)))

C VELOCIDADE SUPERFICIAL
Ua(I) = QG(I)/AA

C Fator Fs
Fs(i)=Ua(i)*rhog(i)**0.5

C VELOCIDADE NOS FUROS
UH(I) = QG(I)/AH

```

C   PARÂMETRO DE FLUXO
    FP(I) = (ML(I)/MG(I)) * (RHOG(I)/RHOL(I)) **0.5

C   ALTURA DA ESPUMA
C   FATOR DA EQUAÇÃO DA ALTURA DE LÍQUIDO CLARO
    N = 4.3*FI**1.5

C   ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, GARCIA (2002) - (T, m; dH, mm) - EM USO
    HL(I) = (0.01728*ML(I)**N*(Ua(I)*(RHOG(I)/
&           RHOL(I))**0.5)**1) / (RHOL(I)*FI**1.5*
&           (T/(DH*1000))**0.42)

C   ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, GARCIA (2002) - (T, m; dH, m)
    HL1(I) = (0.01728*ML(I)**N*(Ua(I)*(RHOG(I)/
&           RHOL(I))**0.5)**1) / (RHOL(I)*FI**1.5*
&           (T/DH)**0.42)

C   ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, Xu (1994) - (T, m; dH, mm)
    N1 = 0.3162*fi**-0.25
    HLXu(I) = (0.006*(ML(I)/Aa)**N1*(Ua(I)*
&           (RHOG(I)/1.183)**0.5)**1.75) / (RHOL(I)*FI**1.9*
&           (T/(DH*1000))**0.42)
    EXu(I) = 1 - 0.0946*((Ua(I)**2*RHOG(I)) / (9.81*HLXu(I)*RHOL(I)))
& ** -0.2

C   POROSIDADE
    E(I) = 1 - 0.0946*((Ua(I)**2*RHOG(I)) / (9.81*HL(I)*RHOL(I))) ** -0.2

C   ALTURA DA ESPUMA
    HF(I) = HL(I) / (1 - E(I))
    HFXu(i) = HLXu(I) / (1 - EXu(I))

C   FATOR DE INUNDAÇÃO
C   FATOR DE CAPACIDADE P/ FI=0,19 - GARCIA (2002)
    CSB(i) = (0.1317*FP(i)**2 - 0.1747*FP(i) + 0.1124) * (0.6649*Ts + 0.5667)

    F(i) = 1 / (1 + 1.4*((RHOL(I) - RHOG(I)) / RHOG(I)) **0.5)
    C1(i) = 0.445*(1 - f(i)) * (sigma(i) * 1000 / (RHOL(I) - RHOG(I))) **0.25
&    - 1.4*(Ql(i)/AA)
    C2(i) = 0.356*(1 - f(i)) * (sigma(i) * 1000 / (RHOL(I) - RHOG(I))) **0.25

C   VELOCIDADE DE INUNDAÇÃO - LOCKETT
    UF(I) = CSB(i) * (SIGMA(I) / 0.02) **0.2*
&           ((RHOL(I) - RHOG(I)) / RHOG(I)) **0.5 * (FI / 0.1) **0.44

C   FATOR DE INUNDAÇÃO
    FF(I) = Ua(I) / UF(I)
C   FF constante pois senão arraste muito alto
C   FF(i) = 0.90

C   FASE LÍQUIDA
C   ZONA 1
C   FRAÇÃO DE FUIROS PASSANDO VAPOR -
C   GARCIA 2002 AO INVÉS DE (1-FLC) DO PRADO 1990
    Xf(I) = 0.4668*(FI/0.2)**0.8*(TS/0.610)**0.2*
&           DEXP(-0.35*(DABS(FF(I)*100-90)/45))

C   DIÂMETRO DO JET
    DJ(I) = 1.1*DH + 0.25*HL(I)

C   VELOCIDADE DO JET COM "Xf" AO INVÉS DE (1-FLC)
    UJ(I) = (UH(I)*DH**2) / (Xf(I)*DJ(I)**2)

C   REYNOLDS NO FURO
    REH(I) = DH*UH(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   ALTURA DO JET - Garcia 2000
    HJ(I) = 1.1E-3*dH**0.2*Reh(I)**0.46

C   TEMPO RESIDÊNCIA ZONA 1
    TG1(I) = HJ(I) / UJ(I)

C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
    FTM(I) = (RHOL(I)*MG(I)*DL**0.5) /
&           (3.1416**0.5*RHOG(I)*ML(I))

```

```

C      NTUL ZONA 1
      NL1(I) = (8*FTM(I)*TG1(I)**0.5)/DJ(I)

C      ZONA 2
C      DIAMÉTRO DAS BOLHAS
C      Diâmetro de bolhas pequenas (Garcia 2000)
      Dbs(i)=3.34/(Ua(i)*9.8)**0.4*(sigma(i)/rhol(i))**0.6*
&      (mil(i)/mig(i))**0.1

C      Diâmetro de bolhas grandes (Garcia 2000)
      Dbl(i)=Dbs(i)*(0.83+41.5*(sigma(i))**0.6*
&      (mil(i)/rhog(i))**0.1)

C      DIAMÉTRO MÉDIO SAUTER DAS BOLHAS (Garcia 2000) nova correl.
C      Fator de correção

      IF (sigma(i) .GT. 5E-3) then
        sigCSB(i)=1
      ELSE
        sigCSB(i)=3*sigma(i)**0.6
      endIF

      IF (mil(i) .GT. 0.6E-3) then
        milCSB(i)=4.13*mil(i)**1.5
      ELSE
        milCSB(i)=1
      endIF

C      Para hW = 0: 8.3*hL(i)**0.7
      Fi3(i)=8.3*hL(i)**0.7*milCSB(i)*sigCSB(i)

C      Cálculo de Dbls e Dbss
      Dbls(i)=fi3(i)*0.605*dH**0.84*uH(i)**0.18/((QL(i)/lw)**0.07)
      Dbss(i)=fi3(i)*0.660*dH**0.84*uH(i)**0.085/((QL(i)/lw)**0.08)

C      VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS - Garcia 2000
C      Número de Eotvos
      Eo(i) = 9.8*(rhol(i)-rhog(i))*Dbs(i)**2/sigma(i)
      Eo1(i) = 9.8*(rhol(i)-rhog(i))*Dbss(i)**2/sigma(i)

C      Número de Morton
      Mo(i) = 9.81*mil(I)**4*(rhol(i)-rhog(i))/(rhol(i)**2*
&      sigma(i)**3)

C      Constante H
      H(i)=4/3*Eo(i)*Mo(i)**-0.149*(mil(i)/9.12E-4)**-0.14
      H1(i)=4/3*Eo1(i)*Mo(i)**-0.149*(mil(i)/9.12E-4)**-0.14

      IF (H(i) .GT. 59.3) then
        J(i)=3.42*H(i)**0.441
      ELSE
        J(i)=0.94*H(i)**0.757
      endIF

      IF (H1(i) .GT. 59.3) then
        J1(i)=3.42*H1(i)**0.441
      ELSE
        J1(i)=0.94*H1(i)**0.757
      endIF

C      Veloc. terminal das bolhas peq nas zonas 2 e 4 (Garcia 2000)
      uSB(i)=mil(i)/(rhol(i)*Dbs(i))*Mo(i)**-0.149*(J(i)-0.857)

C      Velocidade terminal das bolhas Dbss na zonas 5 (Garcia 2000)
      ubss(i)=mil(i)/(rhol(i)*Dbss(i))*Mo(i)**-0.149*(J1(i)-0.857)

C      Fração de bolhas pequenas na espuma (Garcia 2000)
C      Prop. do ar e da água simulados no Aspen à 1 atm e 25°C
      AJ(i) = 1 - 0.463*(sigma(i)/0.07282)**0.6*
&      (mil(i)/9.12E-4*1.845E-5/mig(i))**
&      0.1*(994.7/rhol(i))**0.6*(1.183/rhog(i))**0.1

C      Não foi incluída correção de AJ quando mil>0.6E-3 e sigma<50E-3

C      Velocidade de subida das bolhas grandes (Prado 1990)
      uLB(i) = Ua(i)/((1 - AJ(i))*E(i)) - uSB(i)*AJ(i)/(1-AJ(i))

```

```

C      Tempo de residência -
C      VERIFICAR SE hF > hJ senão fazer (hF-hJ) = hF
      IF (hF(i) .GT. hJ(i)) then
          tG2S(i) = (hF(i)-hJ(i))/usb(i)
          tG2L(i) = (hF(i)-hJ(i))/uLB(i)
      ELSE
          tG2S(i) = hF(i)/usb(i)
          tG2L(i) = hF(i)/uLB(i)
      endIF

C      NUT ZONA 2
      NL2S(i) = 12*FTM(i)*tG2S(i)**0.5/DbS(i)
      NL2L(i) = 12*FTM(i)*tG2L(i)**0.5/DbL(i)

C      ZONA 3
C      Tempo de residência
      uLB3(i) = Ua(i)/E(i)
      tG3(i) = DbLS(i)/uLB3(i)

C      NUT Zona 3
      NL3(i) = 12*FTM(i)*tG3(i)**0.5/DbLS(i)

C      ZONA 4
C      Tempo de residência
C      VERIFICAR SE hF > DbLS senão fazer (hF-DbLS) = hF
      IF (hF(i) .GT. DbLS(i)) then
          tG4S(i) = (hF(i)-DbLS(i))/usb(i)
          tG4L(i) = (hF(i)-DbLS(i))/uLB(i)
      ELSE
          tG4S(i) = hF(i)/usb(i)
          tG4L(i) = hF(i)/uLB(i)
      endIF

C      NUT zona 4
      NL4S(i)=12*FTM(i)*tG4S(i)**0.5/DbS(i)
      NL4L(i)=12*FTM(i)*tG4L(i)**0.5/DbL(i)

C      ZONA 5
      tG5(i)=hF(i)/uLB3(i)
      NL5(i)=12*FTM(i)*tG5(i)**0.5/DbSS(i)

C      ESTIMATIVA DA QUANTIDADE DE FUIROS EM REGIME JET

C      FJ (Prado, 1990)
      uA0(i)=0.1*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*hw**0.132*
& dH**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
      uA100(i)=1.1*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*hw**0.132*
& dH**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
      FJ1(i)=(uA(i)-uA0(i))/(uA100(i)-uA0(i))

C      FJ (Prado, 1987)
      uatP(i)=(0.04302*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*sigma(i)**0.06*
& fi**0.25*(QL(i)/LW)**0.05*dH**0.1)*(2.58717*hw+0.86)

      uA0P(i)=10.38*hw**0.132*dH**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
      uA100P(i)=10.985549*uA0(i)

      FJP(i)=(uA(i)*dH**0.27/(103.65*fi*(hw**0.5*(QL(i)/LW)**0.27))
& -0.1

C      Considerando FJ=60% qdo Ua=UatP transição (Prado, 1987)-em uso
      FJ(i)=Ua(i)*0.6/UatP(i)

C      Maximizando FJ:
C      FJ(I)=0.958

C      Constantes FSB e FLB
      FSB=165*dH**1.32*fi**1.33
      FLB(i)=1-FJ(i)-FSB

C      Cálculo da eficiência na fase líquida
      NLFJ(i)=NL1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL2S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL2L(i))))))
      NLFJB(i)= NL3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL4S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL4L(i))))))

      EL(i)=FJ(i)*(1-DEXP(-NLFJ(i)))+FLB(i)*(1-DEXP(-NLFJB(i)))+

```

```

& FSB*(1-DEXP(-NL5(i)))

C   FASE GÁS
C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
FTMG(I)=(ML(I)*RHOG(I))/(MG(I)*RHOL(I))

C   ZONA1
C   REYNOLDS NO JET
REJ(I)=UJ(I)*DJ(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   SCHIMIDT NA FASE GÁS
SCG(I)=MIG(I)/(RHOG(I)*DG)

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
KG1(I)=0.046*(DG/DJ(I))*REJ(I)**0.96*SCG(I)**0.44

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
KL1(I)=1.13*(DL/TG1(I))**0.5

C   NTU ZONA 1
NG1(I)=FTMG(I)*KG1(I)*NL1(I)/KL1(I)

C   ZONA 2,3,4,5
PEG2S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
PEG2L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
PEG3(I)=DBLS(I)*ULB3(I)/DG
PEG4S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
PEG4L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
PEG5(I)=DBSS(I)*UbsS(I)/DG

IF (PEG2S(I) .GT. 200) THEN
  SH2S(I)=17.9
ELSE
  SH2S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2S(I)))**2
ENDIF

IF (PEG2L(I) .GT. 200) THEN
  SH2L(I)=17.9
ELSE
  SH2L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2L(I)))**2
ENDIF

IF (PEG3(I) .GT. 200) THEN
  SH3(I)=17.9
ELSE
  SH3(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG3(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG3(I)))**2
ENDIF

IF (PEG4S(I) .GT. 200) THEN
  SH4S(I)=17.9
ELSE
  SH4S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4S(I)))**2
ENDIF

IF (PEG4L(I) .GT. 200) THEN
  SH4L(I)=17.9
ELSE
  SH4L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4L(I)))**2
ENDIF

IF (PEG5(I) .GT. 200) THEN
  SH5(I)=17.9
ELSE
  SH5(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG5(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG5(I)))**2
ENDIF

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
KG2S(I)=SH2S(I)*DG/DBS(I)
KG2L(I)=SH2L(I)*DG/DBL(I)
KG3(I)=SH3(I)*DG/DBLS(I)

```

```

KG4S(I)=SH4S(I)*DG/DBS(I)
KG4L(I)=SH4L(I)*DG/DBL(I)
KG5(I)=SH5(I)*DG/DBSS(I)

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
KL2S(I)=1.13*(DL/TG2S(I))**0.5
KL2L(I)=1.13*(DL/TG2L(I))**0.5
KL3(I)=1.13*(DL/TG3(I))**0.5
KL4S(I)=1.13*(DL/TG4S(I))**0.5
KL4L(I)=1.13*(DL/TG4L(I))**0.5
KL5(I)=1.13*(DL/TG5(I))**0.5

C   NUT ZONAS 2,3,4 E 5
NG2S(I)=FTMG(I)*KG2S(I)*NL2S(I)/KL2S(I)
NG2L(I)=FTMG(I)*KG2L(I)*NL2L(I)/KL2L(I)
NG3(I)=FTMG(I)*KG3(I)*NL3(I)/KL3(I)
NG4S(I)=FTMG(I)*KG4S(I)*NL4S(I)/KL4S(I)
NG4L(I)=FTMG(I)*KG4L(I)*NL4L(I)/KL4L(I)
NG5(I)=FTMG(I)*KG5(I)*NL5(I)/KL5(I)

C   Cálculo da eficiência na fase gás
NGFJ(i)=NG1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NG2S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NG2L(i)))))
NGFLB(i)= NG3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NG4S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NG4L(i)))))

EG(i)=FJ(i)*(1-DEXP(-NGFJ(i)))+FLB(i)*(1-DEXP(-NGFLB(i)))+
& FSB*(1-DEXP(-NG5(i)))

C   zona de spray (EG x 1,2) - (Garcia 2002)
EGs(i)=EG(i)*1.2

C   Efeito do arraste de líquido pelo vapor(fi=0,182)-(Garcia 2002)
psi(i)=1.9771*FF(i)-1.4857
Ew(i) = EGs(i)/(1+EGs(i)*psi(i)/(1-psi(i)))

C   Efeito da baixa vazão (weeping) (Garcia 2002)
psil(i)=-0.9333*FF(i)+0.94
Ewl(i) = Ew(i)/(1+Ewl(i)*psil(i)/(1-psil(i)))

C   Método de Xu et al (1994)
NGXu(i)=0.27*EXu(i)*(DG*hLXu(i)/((1-EXu(i))*Ua(i))**0.5*
& (rhol(i)**2*rhog(i))**0.2*Ua(i)**0.4/
& ((1-EXu(i))**0.5*fi**1.32*sigma(i)**0.6*mig(i)**0.1)

NLXu(i) = 7.0*EXu(i)*(DL*hLXu(i)*Aa/QL(i))**0.5*
& (rhol(i)**2*rhog(i))**0.2*Ua(i)**0.4/
& ((1-EXu(i))*fi**1.32*sigma(i)**0.6*mig(i)**0.1)

NOGXu(i)=1/((1/NGXu(i))+(lamb(i)/NLXu(i)))

EOGXu(i)=1-DEXP(-NOGXu(i))
EOGXuw(i) = EOGXu(i)/(1+EOGXu(i)*psi(i)/(1-psi(i)))
EOGXul(i) = EOGXuw(i)/(1+EOGXuw(i)*psil(i)/(1-psil(i)))

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (Garcia=Ewl(i), c/ spray=Egs(i)
C   e Xu = EOGXu(i), c/ arraste EOGXul(i))
EFI(I) = Ewl(i)

C   Eficiência Global
EOG(i)=DLOG(1+Ewl(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
EOG3(i)=DLOG(1+Ew(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
EOG4(i)=DLOG(1+Egs(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
EOG5(i)=DLOG(1+EOGXul(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
EOG6(i)=DLOG(1+EOGXuw(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
EOG7(i)=DLOG(1+EOGXu(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))

SUM1 = SUM1 + Fs(i)
Fsavg = SUM1/(NP-1)

SUM2 = SUM2 + lamb(i)
lambvg = SUM2/(NP-1)

SUM = SUM + EOG(i)
EOGC = SUM/(NP-1)

```

```

SUM3 = SUM3 + EOG3(i)
EOGC3 = SUM3/(NP-1)

SUM4 = SUM4 + EOG4(i)
EOGC4 = SUM4/(NP-1)

SUM5 = SUM5 + EOG5(i)
EOGC5 = SUM5/(NP-1)

SUM6 = SUM6 + EOG6(i)
EOGC6 = SUM6/(NP-1)

SUM7 = SUM7 + EOG7(i)
EOGC7 = SUM7/(NP-1)

SUM8 = SUM8 + ff(i)
ffavg = SUM8/(NP-1)

SUM9 = SUM9 + fJ(i)
fJavg = SUM9/(NP-1)

SUM10 = SUM10 + fJ1(i)
fJ1avg = SUM10/(NP-1)

END DO

C    CÁLCULO DA EFICIÊNCIA GLOBAL POR SEÇÕES
SUM = 0.0
DO i = 2, NF-1
SUM = SUM + EOG(i)
END DO
EOGC1 = SUM/(NF-2)

SUM = 0.0
DO i = NF, NP
SUM = SUM + EOG(i)
END DO
EOGC2 = SUM/(NP-NF+1)

C    VARIÁVEIS DE SAÍDA

```

D2 – Fracionadora de buteno-1

```

QL    Block-Vec Block=04T01 Variable=L-VOLFLOW Sentence=HYDRAULIC
QG    Block-Vec Block=04T01 Variable=V-VOLFLOW Sentence=HYDRAULIC
ML    Block-Vec Block=04T01 Variable=L-MASSFLOW Sentence=HYDRAULIC
MG    Block-Vec Block=04T01 Variable=V-MASSFLOW Sentence=HYDRAULIC
RHOL  Block-Vec Block=04T01 Variable=RHOL Sentence=HYDRAULIC
RHOG  Block-Vec Block=04T01 Variable=RHOV Sentence=HYDRAULIC
SIGMA Block-Vec Block=04T01 Variable=SIGMA Sentence=HYDRAULIC
MWL   Block-Vec Block=04T01 Variable=AVMWL Sentence=HYDRAULIC
MWG   Block-Vec Block=04T01 Variable=AVMWV Sentence=HYDRAULIC
MIL   Block-Vec Block=04T01 Variable=MUL Sentence=HYDRAULIC
MIG   Block-Vec Block=04T01 Variable=MUV Sentence=HYDRAULIC
X     Block-Vec Block=04T01 Variable=X Sentence=COMPS
Y     Block-Vec Block=04T01 Variable=Y Sentence=COMPS

C    INÍCIO

NP = 139
NF = 101
T = 0.0025
DH = 0.006
D = 2.54
AH = 0.9784
DL= 9.79E-9
TS = 0.400
lW = 2.54
hW = 0.00635
DG=6.46E-7

C    ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA)
AA = ((3.1416*D**2)/ 4)

```

```

C      FRAÇÃO DE ÁREA PERFURADA DO PRATO
      FI = AH/AA

C      Numero de componentes
      iC = 15

C      Indice dos componentes chave leve (iL) e pesado (iH)
      iL = 6
      iH = 7

C      Composicao da mistura pseudo-binaria
      Ylk(1)=Y(iL)/(Y(iL)+Y(iH))
      Xlk(1)=X(iL)/(X(iL)+X(iH))

      SUM = 0.0
      SUM1 = 0.0
      SUM2 = 0.0
      SUM3 = 0.0
      SUM4 = 0.0
      SUM5 = 0.0
      SUM6 = 0.0
      SUM7 = 0.0
      SUM8 = 0.0
      SUM9 = 0.0
      SUM10 = 0.0

      DO I = 2 , NP

C      Inclinação da curva de equilibrio
      Ylk(i)=Y(iL+(i-1)*iC)/(Y(iL+(i-1)*iC)+Y(iH+(i-1)*iC))
      Xlk(i)=X(iL+(i-1)*iC)/(X(iL+(i-1)*iC)+X(iH+(i-1)*iC))
      m(i) = (Ylk(i)-Ylk(i-1))/(Xlk(i)-Xlk(i-1))

C      Fator de esgotamento
      lamb(i) = m(i)*((MG(I)/MWG(I))/(ML(I)/MWL(I)))

C      VELOCIDADE SUPERFICIAL
      Ua(I) = QG(I)/AA

C      Fator Fs
      Fs(i)=Ua(i)*rhog(i)**0.5

C      VELOCIDADE NOS FUROS
      UH(I) = QG(I)/AH

C      PARÂMETRO DE FLUXO
      FP(I) = (ML(I)/MG(I))*(RHOG(I)/RHOL(I))**0.5

C      ALTURA DA ESPUMA
C      FATOR DA EQUAÇÃO DA ALTURA DE LíQUIDO CLARO
      N = 4.3*FI**1.5

C      ALTURA DO LíQUIDO CLARO, GARCIA(2002)-(T,m; dH,mm)-EM USO
      HL(I) = (0.01728*ML(I)**N*(Ua(I)*(RHOG(I)/
&          RHOL(I))**0.5)**1)/(RHOL(I)*FI**1.5*
&          (T/(DH*1000))**0.42)

C      ALTURA DO LíQUIDO CLARO, GARCIA(2002)-(T,m; dH,m)
      HL1(I) = (0.01728*ML(I)**N*(Ua(I)*(RHOG(I)/
&          RHOL(I))**0.5)**1)/(RHOL(I)*FI**1.5*
&          (T/DH)**0.42)

C      ALTURA DO LíQUIDO CLARO, Xu(1994)-(T,m; dH,mm)
      N1 = 0.3162*fi**-0.25
      HLXu(I) = (0.006*(ML(I)/Aa)**N1*(Ua(I)*
&          (RHOG(I)/1.183)**0.5)**1.75)/(RHOL(I)*FI**1.9*
&          (T/(DH*1000))**0.42)
      EXu(I)=1-0.0946*((Ua(I)**2*RHOG(I))/(9.81*HLXu(I)*RHOL(I)))
&          **0.2

C      POROSIDADE
      E(I)=1-0.0946*((Ua(I)**2*RHOG(I))/(9.81*HL(I)*RHOL(I)))**0.2

C      ALTURA DA ESPUMA
      HF(I)=HL(I)/(1-E(I))
      HFXu(i) = HLXu(I)/(1-EXu(I))

C      FATOR DE INUNDAÇÃO

```

```

C      FATOR DE CAPACIDADE P/ FI=0,19 - GARCIA (2002)
      CSB(i)=(0.1317*FP(i)**2-0.1747*FP(i)+0.1124)*(0.6649*Ts+0.5667)

      F(i)=1/(1+1.4*((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5)
      C1(i)=0.445*(1-f(i))*(sigma(i)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I))**0.25
&      -1.4*(Q1(i)/AA)
      C2(i)=0.356*(1-f(i))*(sigma(i)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I))**0.25

C      VELOCIDADE DE INUNDAÇÃO - LOCKETT
      UF(I) = CSB(i)*(SIGMA(I)/0.02)**0.2*
&      ((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5*(FI/0.1)**0.44

C      FATOR DE INUNDAÇÃO
      FF(I) = Ua(I)/UF(I)

C      FASE LÍQUIDA
C      ZONA 1
C      FRAÇÃO DE FUROS PASSANDO VAPOR -
C      GARCIA 2002 AO INVÉS DE (1-FLC) DO PRADO 1990
      Xf(I)=0.4668*(FI/0.2)**0.8*(TS/0.610)**0.2*
&      DEXP(-0.35*(DABS(FF(I)*100-90)/45))

C      DIÂMETRO DO JET
      DJ(I)=1.1*DH+0.25*HL(I)

C      VELOCIDADE DO JET COM "Xf" AO INVES DE (1-FLC)
      UJ(I)=(UH(I)*DH**2)/(Xf(I)*DJ(I)**2)

C      REYNOLDS NO FURO
      REH(I)=DH*UH(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C      ALTURA DO JET - Garcia 2000
      HJ(I)=1.1E-3*dH**0.2*Reh(I)**0.46

C      TEMPO RESIDÊNCIA ZONA 1
      TG1(I)=HJ(I)/UJ(I)

C      FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
      FTM(I) = (RHOL(I)*MG(I)*DL**0.5)/
&      (3.1416**0.5*RHOG(I)*ML(I))

C      NTUL ZONA 1
      NL1(I) = (8*FTM(I)*TG1(I)**0.5)/DJ(I)

C      ZONA 2
C      DIÂMETRO DAS BOLHAS
C      Diâmetro de bolhas pequenas (Garcia 2000)
      Dbs(i)=3.34/(Ua(i)*9.8)**0.4*(sigma(i)/rhol(i))**0.6*
&      (mil(i)/mig(i))**0.1

C      Diâmetro de bolhas grandes (Garcia 2000)
      Dbl(i)=Dbs(i)*(0.83+41.5*(sigma(i))**0.6*
&      (mil(i)/rhog(i))**0.1))

C      DIÂMETRO MÉDIO SAUTER DAS BOLHAS (Garcia 2000) nova correl.
C      Fator de correção

      IF (sigma(i) .GT. 5E-3) then
        sigCSB(i)=1
      ELSE
        sigCSB(i)=3*sigma(i)**0.6
      endIF

      IF (mil(i) .GT. 0.6E-3) then
        milCSB(i)=4.13*mil(i)**1.5
      ELSE
        milCSB(i)=1
      endIF

C      Para hW = 0: 8.3*hL(i)**0.7
      Fi3(i)=8.3*hL(i)**0.7*milCSB(i)*sigCSB(i)

C      Cálculo de Dbls e Dbss
      Dbls(i)=fi3(i)*0.605*dH**0.84*uH(i)**0.18/((QL(i)/lw)**0.07)
      Dbss(i)=fi3(i)*0.660*dH**0.84*uH(i)**0.085/((QL(i)/lw)**0.08)

C      VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS - Garcia 2000

```

```

C      Número de Eotvos
      Eo(i) = 9.8*(rhol(i)-rhog(i))*Dbs(i)**2/sigma(i)
      Eol(i) = 9.8*(rhol(i)-rhog(i))*Dbss(i)**2/sigma(i)

C      Número de Morton
      Mo(i) = 9.81*mil(I)**4*(rhol(i)-rhog(i))/(rhol(i)**2*
& sigma(i)**3)

C      Constante H
      H(i)=4/3*Eo(i)*Mo(i)**-0.149*(mil(i)/9.12E-4)**-0.14
      H1(i)=4/3*Eol(i)*Mo(i)**-0.149*(mil(i)/9.12E-4)**-0.14

      IF (H(i) .GT. 59.3) then
        J(i)=3.42*H(i)**0.441
      ELSE
        J(i)=0.94*H(i)**0.757
      endIF

      IF (H1(i) .GT. 59.3) then
        J1(i)=3.42*H1(i)**0.441
      ELSE
        J1(i)=0.94*H1(i)**0.757
      endIF

C      Veloc. terminal das bolhas peq nas zonas 2 e 4 (Garcia 2000)
      uSB(i)=mil(i)/(rhol(i)*Dbs(i))*Mo(i)**-0.149*(J(i)-0.857)

C      Velocidade terminal das bolhas Dbss na zonas 5 (Garcia 2000)
      ubss(i)=mil(i)/(rhol(i)*Dbss(i))*Mo(i)**-0.149*(J1(i)-0.857)

C      Fração de bolhas pequenas na espuma (Garcia 2000)
C      Prop. do ar e da água simulados no Aspen à 1 atm e 25°C
      AJ(i) = 1 - 0.463*(sigma(i)/0.07282)**0.6*
& (mil(i)/9.12E-4*1.845E-5/mig(i))**
& 0.1*(994.7/rhol(i))**0.6*(1.183/rhog(i))**0.1

C      Não foi incluída correção de AJ quando mil>0.6E-3 e sigma<50E-3

C      Velocidade de subida das bolhas grandes (Prado 1990)
      uLB(i) = Ua(i)/((1 - AJ(i))*E(i)) - usb(i)*AJ(i)/(1-AJ(i))

C      Tempo de residência -
C      VERIFICAR SE hF > hJ senão fazer (hF-hJ) = hF
      IF (hF(i) .GT. hJ(i)) then
        tG2S(i) = (hF(i)-hJ(i))/usb(i)
        tG2L(i) = (hF(i)-hJ(i))/uLB(i)
      ELSE
        tG2S(i) = hF(i)/usb(i)
        tG2L(i) = hF(i)/uLB(i)
      endIF

C      NUT ZONA 2
      NL2S(i) = 12*FTM(i)*tG2S(i)**0.5/Dbs(i)
      NL2L(i) = 12*FTM(i)*tG2L(i)**0.5/Dbl(i)

C      ZONA 3
C      Tempo de residência
      uLB3(i) = Ua(i)/E(i)
      tG3(i) = Db1s(i)/uLB3(i)

C      NUT Zona 3
      NL3(i) = 12*FTM(i)*tG3(i)**0.5/Dbls(i)

C      ZONA 4
C      Tempo de residência
C      VERIFICAR SE hF > Db1s senão fazer (hF-Db1s) = hF
      IF (hF(i) .GT. Db1s(i)) then
        tG4S(i) = (hF(i)-Db1s(i))/usb(i)
        tG4L(i) = (hF(i)-Db1s(i))/uLB(i)
      ELSE
        tG4S(i) = hF(i)/usb(i)
        tG4L(i) = hF(i)/uLB(i)
      endIF

C      NUT zona 4
      NL4S(i)=12*FTM(i)*tG4S(i)**0.5/Dbs(i)
      NL4L(i)=12*FTM(i)*tG4L(i)**0.5/Dbl(i)

```

```

C      ZONA 5
      tG5(i)=hF(i)/uLB3(i)
      NL5(i)=12*FTM(i)*tG5(i)**0.5/Dbss(i)

C      ESTIMATIVA DA QUANTIDADE DE FUIROS EM REGIME JET

C      FJ (Prado, 1990)
      uA0(i)=0.1*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*hw**0.132*
& dh**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
      uA100(i)=1.1*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*hw**0.132*
& dh**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
      FJ1(i)=(uA(i)-uA0(i))/(uA100(i)-uA0(i))

C      FJ (Prado, 1987)
      uatP(i)=(0.04302*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*sigma(i)**0.06*
& fi**0.25*(QL(i)/LW)**0.05*dh**0.1)*(2.58717*hw+0.86)

      uA0P(i)=10.38*hw**0.132*dh**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
      uA100P(i)=10.985549*uA0(i)

      FJP(i)=(uA(i)*dh**0.27/(103.65*fi*(hw**0.5*(QL(i)/LW)**0.27))
& -0.1)

C      Considerando FJ=60% qdo Ua=UatP transição (Prado, 1987)-em uso
      FJ(i)=Ua(i)*0.6/UatP(i)

C      Maximizando FJ:
c      FJ(I)=0.05

C      Constantes FSB e FLB
      FSB=165.65*dh**1.32*fi**1.33
      FLB(i)=1-FJ(i)-FSB

C      Cálculo da eficiência na fase líquida
      NLFJ(i)=NL1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL2S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL2L(i)))))
      NLFJB(i)=NL3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL4S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL4L(i)))))

      EL(i)=FJ(i)*(1-DEXP(-NLFJ(i)))+FLB(i)*(1-DEXP(-NLFJB(i)))+
& FSB*(1-DEXP(-NL5(i)))

C      FASE GÁS
C      FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
      FTMG(I)=(ML(I)*RHOG(I))/(MG(I)*RHOL(I))

C      ZONA1
C      REYNOLDS NO JET
      REJ(I)=UJ(I)*DJ(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C      SCHIMIDT NA FASE GÁS
      SCG(I)=MIG(I)/(RHOG(I)*DG)

C      COEFICIENTE DE TM NO GÁS
      KG1(I)=0.046*(DG/DJ(I))*REJ(I)**0.96*SCG(I)**0.44

C      COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
      KL1(I)=1.13*(DL/TG1(I))**0.5

C      NTU ZONA 1
      NG1(I)=FTMG(I)*KG1(I)*NL1(I)/KL1(I)

C      ZONA 2,3,4,5
      PEG2S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
      PEG2L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
      PEG3(I)=DBLS(I)*ULB3(I)/DG
      PEG4S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
      PEG4L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
      PEG5(I)=DBSS(I)*UbsS(I)/DG

      IF (PEG2S(I) .GT. 200) THEN
        SH2S(I)=17.9
      ELSE
&      SH2S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2S(I))-
        5.640*(DLOG10(PEG2S(I)))**2

```

```

ENDIF

IF (PEG2L(I) .GT. 200) THEN
  SH2L(I)=17.9
ELSE
  SH2L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2L(I)))**2
ENDIF

IF (PEG3(I) .GT. 200) THEN
  SH3(I)=17.9
ELSE
  SH3(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG3(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG3(I)))**2
ENDIF

IF (PEG4S(I) .GT. 200) THEN
  SH4S(I)=17.9
ELSE
  SH4S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4S(I)))**2
ENDIF

IF (PEG4L(I) .GT. 200) THEN
  SH4L(I)=17.9
ELSE
  SH4L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4L(I)))**2
ENDIF

IF (PEG5(I) .GT. 200) THEN
  SH5(I)=17.9
ELSE
  SH5(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG5(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG5(I)))**2
ENDIF

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
    KG2S(I)=SH2S(I)*DG/DBS(I)
    KG2L(I)=SH2L(I)*DG/DBL(I)
    KG3(I)=SH3(I)*DG/DBLS(I)
    KG4S(I)=SH4S(I)*DG/DBS(I)
    KG4L(I)=SH4L(I)*DG/DBL(I)
    KG5(I)=SH5(I)*DG/DBSS(I)

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
    KL2S(I)=1.13*(DL/TG2S(I))**0.5
    KL2L(I)=1.13*(DL/TG2L(I))**0.5
    KL3(I)=1.13*(DL/TG3(I))**0.5
    KL4S(I)=1.13*(DL/TG4S(I))**0.5
    KL4L(I)=1.13*(DL/TG4L(I))**0.5
    KL5(I)=1.13*(DL/TG5(I))**0.5

C   NUT ZONAS 2,3,4 E 5
    NG2S(I)=FTMG(I)*KG2S(I)*NL2S(I)/KL2S(I)
    NG2L(I)=FTMG(I)*KG2L(I)*NL2L(I)/KL2L(I)
    NG3(I)=FTMG(I)*KG3(I)*NL3(I)/KL3(I)
    NG4S(I)=FTMG(I)*KG4S(I)*NL4S(I)/KL4S(I)
    NG4L(I)=FTMG(I)*KG4L(I)*NL4L(I)/KL4L(I)
    NG5(I)=FTMG(I)*KG5(I)*NL5(I)/KL5(I)

C   Cálculo da eficiência na fase gás
    NGFJ(i)=NG1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NG2S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NG2L(i))))))
    NGFLB(i)= NG3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NG4S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NG4L(i))))))

    EG(i)=FJ(i)*(1-DEXP(-NGFJ(i)))+FLB(i)*(1-DEXP(-NGFLB(i)))+
& FSB*(1-DEXP(-NG5(i)))

C   zona de spray (EG x 1,2) - (Garcia 2002)
    EGs(i)=EG(i)*1.2

C   Efeito do arraste de líquido pelo vapor(fi=0,182)-(Garcia 2002)

    psi(i)=1.9771*FF(i)-1.4857
    IF (psi(i) .LT. 0) then

```

```

        psi(i)=0
    endIF
    Ew(i) = EGs(i)/(1+EGs(i)*psi(i)/(1-psi(i)))

C    Efeito da baixa vazão (weeping) (Garcia 2002)
    psil(i)=-0.9333*FF(i)+0.94
    Ewl(i) = Ew(i)/(1+Ew(i)*psil(i)/(1-psil(i)))

C    Método de Xu et al (1994)

    NGXu(i)=0.27*EXu(i)*(DG*hLXu(i)/((1-EXu(i))*Ua(i))**0.5*
&         (rhol(i)**2*rhog(i))**0.2*Ua(i)**0.4/
&         ((1-EXu(i))**0.5*fi**1.32*sigma(i)**0.6*mig(i)**0.1)

    NLXu(i) = 7.0*EXu(i)*(DL*hLXu(i)*Aa/QL(i))**0.5*
&         (rhol(i)**2*rhog(i))**0.2*Ua(i)**0.4/
&         ((1-EXu(i))*fi**1.32*sigma(i)**0.6*mig(i)**0.1)

    NOGXu(i)=1/((1/NGXu(i))+(lamb(i)/NLXu(i)))

    EOGXu(i)=1-DEXP(-NOGXu(i))

    EOGXuw(i) = EOGXu(i)/(1+EOGXu(i)*psi(i)/(1-psi(i)))
    EOGXu1(i) = EOGXuw(i)/(1+EOGXuw(i)*psil(i)/(1-psil(i)))

C    CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (Garcia=Ewl(i), c/ spray=Egs(i)
C    e Xu = EOGXu(i), c/ arraste EOGXu1(i))
    EFI(I) = Ewl(I)

C    Eficiência Global
    EOG(i)=DLOG(1+Ewl(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG3(i)=DLOG(1+Ew(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG4(i)=DLOG(1+Egs(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG5(i)=DLOG(1+EOGXu1(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG6(i)=DLOG(1+EOGXuw(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG7(i)=DLOG(1+EOGXu(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))

    SUM1 = SUM1 + Fs(i)
    Fsavg = SUM1/(NP-1)

    SUM2 = SUM2 + lamb(i)
    lambvg = SUM2/(NP-1)

    SUM = SUM + EOG(i)
    EOGC = SUM/(NP-1)

    SUM3 = SUM3 + EOG3(i)
    EOGC3 = SUM3/(NP-1)

    SUM4 = SUM4 + EOG4(i)
    EOGC4 = SUM4/(NP-1)

    SUM5 = SUM5 + EOG5(i)
    EOGC5 = SUM5/(NP-1)

    SUM6 = SUM6 + EOG6(i)
    EOGC6 = SUM6/(NP-1)

    SUM7 = SUM7 + EOG7(i)
    EOGC7 = SUM7/(NP-1)

    SUM8 = SUM8 + FF(i)
    FFAVG = SUM8/(NP-1)

    SUM9 = SUM9 + FJ(i)
    FJAVG = SUM9/(NP-1)

    SUM10 = SUM10 + FJ1(i)
    FJ1AVG = SUM10/(NP-1)

    END DO

C    CÁLCULO DA EFICIÊNCIA GLOBAL POR SEÇÕES
    SUM = 0.0
    DO i = 2, NF-1
    SUM = SUM + EOG(i)
    END DO

```

```

EOGC1 = SUM/(NF-2)

SUM = 0.0
DO i = NF, NP
SUM = SUM + EOG(i)
END DO
EOGC2 = SUM/(NP-NF+1)

```

C VARIÁVEIS DE SAÍDA

D3 – Fracionadora de C6

```

QL      Block-Vec Block=122T01 Variable=L-VOLFLOW Sentence=HYDRAULIC
QG      Block-Vec Block=122T01 Variable=V-VOLFLOW Sentence=HYDRAULIC
ML      Block-Vec Block=122T01 Variable=L-MASSFLOW Sentence=HYDRAULIC
MG      Block-Vec Block=122T01 Variable=V-MASSFLOW Sentence=HYDRAULIC
RHOL    Block-Vec Block=122T01 Variable=RHOL Sentence=HYDRAULIC
RHOG    Block-Vec Block=122T01 Variable=RHOV Sentence=HYDRAULIC
SIGMA   Block-Vec Block=122T01 Variable=SIGMA Sentence=HYDRAULIC
MWL     Block-Vec Block=122T01 Variable=AVMWL Sentence=HYDRAULIC
MWG     Block-Vec Block=122T01 Variable=AVMWV Sentence=HYDRAULIC
MIL     Block-Vec Block=122T01 Variable=MUL Sentence=HYDRAULIC
MIG     Block-Vec Block=122T01 Variable=MUV Sentence=HYDRAULIC
X       Block-Vec Block=122T01 Variable=X Sentence=COMPS
Y       Block-Vec Block=122T01 Variable=Y Sentence=COMPS

```

C INÍCIO

```

NP = 61
NF = 31
T = 0.0025
DH = 0.040
D = 1.85
AH = 0.37824
DL = 6.55E-9
TS = 0.500
lw = 1.264
hw = 0.052
DG = 3.20E-6
ADFR = 0.0807
Z = 1.35

```

C ÁREA TOTAL
 $AT = ((3.1416 * D^2) / 4)$

C ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA)
 $AA = AT - 2 * (ADFR * AT)$

C ÁREA LÍQUIDA (NET)
 $AN = AT - ADFR * AT$

C LARGURA DO DOWNCOMER
 $LDC = (D - Z) / 2$

C FRAÇÃO DE ÁREA PERFURADA DO PRATO
 $FI = AH / AA$

C Numero de componentes
 $iC = 19$

C Indice dos componentes chave leve (iL) e pesado (iH)
 $iL = 5$
 $iH = 8$

C Composicao da mistura pseudo-binaria
 $Ylk(1) = Y(iL) / (Y(iL) + Y(iH))$
 $Xlk(1) = X(iL) / (X(iL) + X(iH))$

```

SUM = 0.0
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
SUM4 = 0.0
SUM5 = 0.0

```

```

SUM6 = 0.0
SUM7 = 0.0
sum8 = 0.0
sum9 = 0.0

DO I = 2 , NP

C   Inclinação da curva de equilibrio
    Ylk(i)=Y(iL+(i-1)*iC)/(Y(iL+(i-1)*iC)+Y(iH+(i-1)*iC))
    Xlk(i)=X(iL+(i-1)*iC)/(X(iL+(i-1)*iC)+X(iH+(i-1)*iC))
    m(i) = (Ylk(i)-Ylk(i-1))/(Xlk(i)-Xlk(i-1))
    m(35)=m(34)
    m(36)=m(34)
    m(37)=m(34)
    m(38)=m(34)
    m(39)=m(34)
    m(40)=m(34)

C   Fator de esgotamento
    lamb(i) = m(i)*((MG(I)/MWG(I))/(ML(I)/MWL(I)))

C   VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET
    US(I) = QG(I)/AN

C   VELOC. SUP. BASEADA NA ÁREA ATIVA.
    UA(I)=QG(I)/AA

C   FATOR FS
    Fs(i)=Ua(i)*rhog(i)**0.5

C   VELOCIDADE NOS FUROS
    UH(I) = QG(I)/AH

C   PARÂMETRO DE FLUXO
    FP(I) = (ML(I)/MG(I))*(RHOG(I)/RHOL(I))**0.5

C   ALTURA DA ESPUMA

C   FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
    RHOM(I)=(RHOG(I)/(RHOL(I)-RHOG(I)))
    ALPH(I)=DEXP(-12.55*(UA(I)*RHOM(I)**0.5)**0.91)

C   FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
    C=0.50+0.438*DEXP(-137.8*HW)

C   ALTURA DO LIQUIDO CLARO, BENNETT ET AL (1983) EM USO CHAN
    HLI(I)=ALPH(I)*(HW+C*(QL(I)/(LW*ALPH(I)))**0.67)

C   ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, DHULESIA (1984) EM USO GARCIA
    HL(I)=0.42*(QL(I)/(LW*UA(I))*(RHOL(I)/RHOG(I))**0.5)**0.33*
& HW**0.67

C   ALTURA DO LÍQ. CLARO, BRAMBILLA ET AL. (1969)
    HL2(i)=0.74*hw-0.0145*Fs(i)+1.66*QL(i)/Lw+0.003

C   ALTURA DO LÍQ. CLARO DINÂMICO, LOCKETT EQ 3.7
    HLD(I)=HL(I)-UA(I)*RHOG(I)*(UH(I)-UA(I))/(RHOL(I)*9.81)

C   ALTURA DA ESPUMA, TODD & VAN WINKLE (1972)
    HF(I)=0.076+32.6*FS(I)**2/(RHOL(I)-RHOG(I))+0.82*HLD(I)

C   PRORSIDADE
    E(I)=1-HL(I)/HF(I)

C   FATOR DE INUNDAÇÃO
C   FATOR DE CAPACIDADE, TREYBAL (1968)
    CSB(I)=(0.0744*TS+0.0117)*(DLOG10(FP(I)**-1))+0.0304*TS+0.0153

    F(i)=1/(1+1.4*((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5)
    C1(i)=0.445*(1-f(i))*(sigma(i)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I))**0.25
& -1.4*(Ql(i)/AA)
    C2(i)=0.356*(1-f(i))*(sigma(i)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I))**0.25

C   VELOCIDADE DE INUNDAÇÃO - LOCKETT
    UF(I) = CSB(i)*(SIGMA(I)/0.02)**0.2*
& ((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5*(FI/0.1)**0.44

```

```

C      FATOR DE INUNDAÇÃO
      FF(I) = US(I)/UF(I)

C      FASE LÍQUIDA
C      ZONA 1
C      FRAÇÃO DE FUIROS PASSANDO VAPOR, PRADO 1990
      XF(I)=1-1836.97*UH(I)**-1.602*(QL(I)/LW)**0.524*HW**0.292
C      Figura 5-6 (Prado,1987)
      XF(i)=0.90
C      Segundo Garcia 1999, pg 183, FLC=0, Xf=1,0
      Xf(i)=1.0
C      DIÂMETRO DO JET
      DJ(I)=1.1*DH+0.25*HL(I)

C      VELOCIDADE DO JET COM "Xf" AO INVES DE (1-FLC)
      UJ(I)=(UH(I)*DH**2)/(Xf(I)*DJ(I)**2)

C      REYNOLDS NO FURO
      REH(I)=DH*UH(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C      ALTURA DO JET - Garcia 2000
      HJ(I)=1.1E-3*dH**0.2*Reh(I)**0.46

C      TEMPO RESIDÊNCIA ZONA 1
      TG1(I)=HJ(I)/UJ(I)

C      FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
      FTM(I) = (RHOL(I)*MG(I)*DL**0.5)/
&      (3.1416**0.5*RHOG(I)*ML(I))

C      NTUL ZONA 1
      NL1(I) = (8*FTM(I)*TG1(I)**0.5)/DJ(I)

C      ZONA 2
C      DIÂMETRO DAS BOLHAS
C      Diâmetro de bolhas pequenas (Garcia 2000)
      Dbs(i)=3.34/(UA(i)*9.8)**0.4*(sigma(i)/rhol(i))**0.6*
&      (mil(i)/mig(i))**0.1

C      Diâmetro de bolhas grandes (Garcia 2000) ao invés de
      Dbl(i)=Dbs(i)*(0.83+41.5*(sigma(i)**0.6*
&      (mil(i)/rhog(i))**0.1))

C      DIÂMETRO MÉDIO SAUTER DAS BOLHAS (Garcia 2000) nova correl.
C      Fator de correção
      IF (sigma(i) .GT. 5E-3) then
          sigCSB(i)=1
      ELSE
          sigCSB(i)=3*sigma(i)**0.6
      endIF

      IF (mil(i) .GT. 0.6E-3) then
          milCSB(i)=4.13*mil(i)**1.5
      ELSE
          milCSB(i)=1
      endIF

C      Como hW > 0,0254 então hWCSB=1.0
      Fi3(i)= 1.0 * milCSB(i) * sigCSB(i)

C      Cálculo de Dbls e Dbss
      Dbls(i)=fi3(i)*0.605*dH**0.84*uh(i)**0.18/((QL(i)/LW)**0.07)
      Dbss(i)=fi3(i)*0.660*dH**0.84*uh(i)**0.085/((QL(i)/LW)**0.08)

C      VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS - Garcia 2000
C      Número de Eotvos
      Eo(i) = 9.8*(rhol(i)-rhog(i))*Dbs(i)**2/sigma(i)
      Eo1(i) = 9.8*(rhol(i)-rhog(i))*Dbss(i)**2/sigma(i)

C      Número de Morton
      Mo(i) = 9.81*mil(I)**4*(rhol(i)-rhog(i))/(rhol(i)**2*
&      sigma(i)**3)

C      Constante H
      H(i)=4/3*Eo(i)*Mo(i)**-0.149*(mil(i)/9.12E-4)**-0.14
      H1(i)=4/3*Eo1(i)*Mo(i)**-0.149*(mil(i)/9.12E-4)**-0.14

```

```

IF (H(i) .GT. 59.3) then
  J(i)=3.42*H(i)**0.441
ELSE
  J(i)=0.94*H(i)**0.757
endIF

IF (H1(i) .GT. 59.3) then
  J1(i)=3.42*H1(i)**0.441
ELSE
  J1(i)=0.94*H1(i)**0.757
endIF

C   Veloc. terminal das bolhas peq nas zonas 2 e 4 (Garcia 2000)
uSB(i)=mil(i)/(rhol(i)*Dbss(i))*Mo(i)**-0.149*(J(i)-0.857)

C   Velocidade terminal das bolhas Dbss na zonas 5 (Garcia 2000)
ubss(i)=mil(i)/(rhol(i)*Dbss(i))*Mo(i)**-0.149*(J1(i)-0.857)

C   Fração de bolhas pequenas na espuma (Garcia 2000)
C   Prop. do ar e da água simulados no Aspen à 1 atm e 25°C
AJ(i) = 1 - 0.463*(sigma(i)/0.07282)**0.6*
& (mil(i)/9.12E-4*1.845E-5/mig(i))**
& 0.1*(994.7/rhol(i))**0.6*(1.183/rhog(i))**0.1

C   Não foi incluída correção de AJ quando mil>0.6E-3 e sigma<50E-3

C   Velocidade de subida das bolhas grandes (Prado 1990)
uLB(i) = uS(i)/((1 - AJ(i))*E(i) - uSB(i)*AJ(i)/(1-AJ(i)))

C   Tempo de residência -
C   VERIFICAR SE hF > hJ senão fazer (hF-hJ) = hF
IF (hF(i) .GT. hJ(i)) then
  tG2S(i) = (hF(i)-hJ(i))/uSB(i)
  tG2L(i) = (hF(i)-hJ(i))/uLB(i)
ELSE
  tG2S(i) = hF(i)/uSB(i)
  tG2L(i) = hF(i)/uLB(i)
endIF

C   NUT ZONA 2
NL2S(i) = 12*FTM(i)*tG2S(i)**0.5/Dbss(i)
NL2L(i) = 12*FTM(i)*tG2L(i)**0.5/Db1(i)

C   ZONA 3
C   Tempo de residência
uLB3(i) = uS(i)/E(i)
tG3(i) = Db1s(i)/uLB3(i)

C   NUT Zona 3
NL3(i) = 12*FTM(i)*tG3(i)**0.5/Db1s(i)

C   ZONA 4
C   Tempo de residência
C   VERIFICAR SE hF > Db1s senão fazer (hF-Db1s) = hF
IF (hF(i) .GT. Db1s(i)) then
  tG4S(i) = (hF(i)-Db1s(i))/uSB(i)
  tG4L(i) = (hF(i)-Db1s(i))/uLB(i)
ELSE
  tG4S(i) = hF(i)/uSB(i)
  tG4L(i) = hF(i)/uLB(i)
endIF

C   NUT zona 4
NL4S(i)=12*FTM(i)*tG4S(i)**0.5/Dbss(i)
NL4L(i)=12*FTM(i)*tG4L(i)**0.5/Db1(i)

C   ZONA 5
tG5(i)=hF(i)/uLB3(i)
NL5(i)=12*FTM(i)*tG5(i)**0.5/Dbss(i)

C   ESTIMATIVA DA QUANTIDADE DE FUROS EM REGIME JET

C   FJ (Prado, 1990)
uA0(i)=0.1*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*hW**0.132*

```

```

& dh**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
  uA100(i)=1.1*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*hw**0.132*
& fi**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
  FJ1(i)=(uA(i)-uA0(i))/(uA100(i)-uA0(i))

C    FJ (Prado, 1987)
  uatP(i)=(0.04302*rhog(i)**-0.5*rhol(i)**0.692*sigma(i)**0.06*
& fi**0.25*(QL(i)/LW)**0.05*dh**0.1)*(2.58717*hw+0.86)

  uA0P(i)=10.38*hw**0.132*dh**0.26*fi**0.992*(QL(i)/LW)**0.27
  uA100P(i)=10.985549*uA0(i)

  FJP(i)=(uA(i)*dh**0.27/(103.65*fi*(hw**0.5*(QL(i)/LW)**0.27))
&      -0.1

C    Considerando FJ=60% qdo Ua=UatP transição (Prado, 1987)-em uso
  FJ(i)=Ua(i)*0.6/UatP(i)

C    Maximizando FJ:
C    FJ(I)=0.77

C    Constantes FSB e FLB
  FSB=165.65*dh**1.32*fi**1.33
  FLB(i)=1-FJ(i)-FSB

C    Cálculo da eficiência na fase líquida
  NLFJ(i)=NL1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL2S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL2L(i))))))
  NLF4B(i)= NL3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL4S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL4L(i))))))

  EL(i)=FJ(i)*(1-DEXP(-NLFJ(i)))+FLB(i)*(1-DEXP(-NLF4B(i)))+
& FSB*(1-DEXP(-NL5(i)))

C    FASE GÁS
C    FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
  FTMG(I)=(ML(I)*RHOG(I))/(MG(I)*RHOL(I))

C    ZONA1
C    REYNOLDS NO JET
  REJ(I)=UJ(I)*DJ(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C    SCHIMIDT NA FASE GÁS
  SCG(I)=MIG(I)/(RHOG(I)*DG)

C    COEFICIENTE DE TM NO GÁS
  KG1(I)=0.046*(DG/DJ(I))*REJ(I)**0.96*SCG(I)**0.44

C    COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
  KL1(I)=1.13*(DL/TG1(I))**0.5

C    NTU ZONA 1
  NG1(I)=FTMG(I)*KG1(I)*NL1(I)/KL1(I)

C    ZONA 2,3,4,5
  PEG2S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
  PEG2L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
  PEG3(I)=DBLS(I)*ULB3(I)/DG
  PEG4S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
  PEG4L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
  PEG5(I)=DBSS(I)*UbsS(I)/DG

  IF (PEG2S(I) .GT. 200) THEN
    SH2S(I)=17.9
  ELSE
    SH2S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2S(I)))**2
  ENDDIF

  IF (PEG2L(I) .GT. 200) THEN
    SH2L(I)=17.9
  ELSE
    SH2L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2L(I)))**2
  ENDDIF

```

```

IF (PEG3(I) .GT. 200) THEN
  SH3(I)=17.9
ELSE
  SH3(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG3(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG3(I)))**2
ENDIF

IF (PEG4S(I) .GT. 200) THEN
  SH4S(I)=17.9
ELSE
  SH4S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4S(I)))**2
ENDIF

IF (PEG4L(I) .GT. 200) THEN
  SH4L(I)=17.9
ELSE
  SH4L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4L(I)))**2
ENDIF

IF (PEG5(I) .GT. 200) THEN
  SH5(I)=17.9
ELSE
  SH5(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG5(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG5(I)))**2
ENDIF

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
    KG2S(I)=SH2S(I)*DG/DBS(I)
    KG2L(I)=SH2L(I)*DG/DBL(I)
    KG3(I)=SH3(I)*DG/DBLS(I)
    KG4S(I)=SH4S(I)*DG/DBS(I)
    KG4L(I)=SH4L(I)*DG/DBL(I)
    KG5(I)=SH5(I)*DG/DBSS(I)

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
    KL2S(I)=1.13*(DL/TG2S(I))**0.5
    KL2L(I)=1.13*(DL/TG2L(I))**0.5
    KL3(I)=1.13*(DL/TG3(I))**0.5
    KL4S(I)=1.13*(DL/TG4S(I))**0.5
    KL4L(I)=1.13*(DL/TG4L(I))**0.5
    KL5(I)=1.13*(DL/TG5(I))**0.5

C   NUT ZONAS 2,3,4 E 5
    NG2S(I)=FTMG(I)*KG2S(I)*NL2S(I)/KL2S(I)
    NG2L(I)=FTMG(I)*KG2L(I)*NL2L(I)/KL2L(I)
    NG3(I)=FTMG(I)*KG3(I)*NL3(I)/KL3(I)
    NG4S(I)=FTMG(I)*KG4S(I)*NL4S(I)/KL4S(I)
    NG4L(I)=FTMG(I)*KG4L(I)*NL4L(I)/KL4L(I)
    NG5(I)=FTMG(I)*KG5(I)*NL5(I)/KL5(I)

C   Cálculo da eficiência na fase gás
    NGFJ(i)=NG1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NG2S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NG2L(i))))))
    NGFLB(i)= NG3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NG4S(i))))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NG4L(i))))))

    EG(i)=FJ(i)*(1-DEXP(-NGFJ(i)))+FLB(i)*(1-DEXP(-NGFLB(i)))+
& FSB*(1-DEXP(-NG5(i)))

C   MÉTODO DE CHAN E FAIR (1984)

C   TEMPO DE RESIDENCIA DO VAPOR
    TG(I)=((1-ALPH(I))*HL1(I))/(ALPH(I)*UA(I))

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE VAPOR
    NG(I)=(10300-8670*FF(I))*FF(I)*SQRT(DG/HL1(I))*TG(I)

C   TEMPO DE RESIDENCIA DO LIQUIDO
    TL(I)=HL1(I)*2*LW/QL(I)

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE LIQUIDA
    NL(I)=19700*DL**0.5*(0.4*FS(I)+0.17)*TL(I)

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA GLOBAL

```

```

NOG(I)=1/((LAMB(I)/NL(I))+1/NG(I))

C   EFICIENCIA DE PONTO
    EGI(I)=1-EXP(-NOG(I))

C   MODELO DE MISTURA(EG PARA EMV)
C   DIFUSIVIDADE TURBULENTA, MOLNAR (1974)
    DE(I)=(0.0005+0.01285*UA(I)+6.32*QL(I)/LW+0.312*HW)**2

C   NÚMERO DE PECLET, LOCKETT
    PE(i)=(ML(I)/MWL(i))*D/(LW*HL(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
    PE1(i)=(ML(I)/MWL(i))*D/(LW*HL1(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))

C   VERIFICAR TIPO DE FLUXO NO PRATO

    IF (PE(i) .GT. 20) THEN
C     CÁLCULO DE EMV PARA PLUG FLOW
        EMV(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG(I))-1)/LAMB(I)
    ELSE
C     FATOR N
        N(I)=(PE(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*EG(I)/PE(I)))-1)
C     CÁLCULO DE N+PE=cteT
        cteT(I)=N(I)+PE(I)
C     CÁLCULO DE EMV PARA MISTURA PARCIAL
        EMV(I)=EG(I)*((1-EXP(-cteT(I)))/(cteT(I)*
&          (1+cteT(I)/N(I)))+
&          (EXP(N(I))-1)/N(I)*(1+N(I)/cteT(I)))
    ENDIF

    IF (PE1(i) .GT. 20) THEN
C     CÁLCULO DE EMV1 PARA PLUG FLOW
        EMV1(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG1(I))-1)/LAMB(I)
    ELSE
C     FATOR N1
        N1(I)=(PE1(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*EG1(I)/PE1(I)))-1)
C     CÁLCULO DE N1+PE1=T1
        cteT1(I)=N1(I)+PE1(I)
C     CÁLCULO DE EMV1 PARA MISTURA PARCIAL
        EMV1(I)=EG1(I)*((1-EXP(-cteT1(I)))/(cteT1(I)*
&          (1+cteT1(I)/N1(I)))+
&          (EXP(N1(I))-1)/N1(I)*(1+N1(I)/cteT1(I)))
    ENDIF

C   ARRASTE DE LÍQUIDO (SPRAY ENTRAINMENT), ZUIDERWEG (1982)
    HB(I)=HL(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL(I))**0.5*
&          (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)
    HB1(I)=HL1(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL1(I))**0.5*
&          (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)

    LE(I)=1E-8*(HB(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2
    LE1(I)=1E-8*(HB1(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2

C   EFICIÊNCIA APARENTE A PARTIR DA EFIC. DRY, COLBURN (1936)
    EMVA(I)=EMV(I)/(1+LE(I)*EMV(I))
    EMVA1(I)=EMV1(I)/(1+LE1(I)*EMV1(I))

C   ESTIMATIVA DE WEEPING (Lockett pg. 115)
    Frh(i)=uH(i)*(rhog(i)/(9.81*hL(i)*(rhoh(i)-rhog(i))))**0.5
    Weep(i)=0.020*Frh(i)**-1-0.030

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (Garcia=EMVA(i) e Chan = EMVA1(i) )
    EFI(I) = EMVA(I)

C   RESTRIÇÃO QUANDO A EFICIÊNCIA É > 1, POIS ASPEN NÃO ACEITA
    IF (EFI(i) .GT. 1.0) THEN
        EFI(I)=1
    ELSE
        EFI(I) = EMVA(I)
    END IF

C   Eficiência Global
    EOG(i)=DLOG(1+EMVA(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG3(i)=DLOG(1+Eg(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG4(i)=DLOG(1+EMVA1(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))
    EOG5(i)=DLOG(1+Eg1(i)*(lamb(i)-1))/DLOG(lamb(i))

```

```

SUM1 = SUM1 + Fs(i)
Fsavg = SUM1/(NP-1)

SUM2 = SUM2 + lamb(i)
lambvg = SUM2/(NP-1)

SUM = SUM + EOG(i)
EOGC = SUM/(NP-1)

SUM3 = SUM3+ EOG3(i)
EOGC3 = SUM3/(NP-1)

SUM4 = SUM4 + EOG4(i)
EOGC4 = SUM4/(NP-1)

SUM5 = SUM5 + EOG5(i)
EOGC5 = SUM5/(NP-1)

SUM6 = SUM6 + weep(i)
weepvg = SUM6/(NP-1)

SUM7 = SUM7 + ff(i)
FFavg = SUM7/(NP-1)

SUM8 = SUM8 + fj(i)
Fjavg = SUM8/(NP-1)

SUM9 = SUM9 + fj1(i)
Fj1avg = SUM9/(NP-1)

END DO

C    CÁLCULO DA EFICIÊNCIA GLOBAL POR SEÇÕES
SUM = 0.0
DO i = 2, NF-1
SUM = SUM + EOG(i)
END DO
EOGC1 = SUM/(NF-2)

SUM = 0.0
DO i = NF, NP
SUM = SUM + EOG(i)
END DO
EOGC2 = SUM/(NP-NF+1)

C    VARIÁVEIS DE SAÍDA

```